

Filosofía de la química

DAVIS BAIRD
ERIC SCERRI
LEE MCINTYRE
(COORDINADORES)

Síntesis de una nueva disciplina

Filosofía de la química

SÍNTESIS DE UNA NUEVA DISCIPLINA

Davis Bair • Scerri Eric • McIntyre Lee
(coodinadores)

Traducción de GERARDO NORIEGA

Revisión técnica MARTÍN LABARCA



Primera edición en inglés, 2006
Primera edición en español, 2011
Primera edición electrónica, 2013

Título original: *Philosophy of Chemistry. Synthesis of a New Discipline*

Carretera Picacho-Ajusco, 227; 14738 México, D. F.
Empresa certificada ISO 9001:2008



www.fondodeculturaeconomica.com

Comentarios:
editorial@fondodeculturaeconomica.com
Tel. (55) 5227-4672

ISBN 978-607-16-1385-1

Hecho en México - *Made in Mexico*

ÍNDICE

Primera parte
LA QUÍMICA Y LA FILOSOFÍA DE LA QUÍMICA

I. *Introducción. La invisibilidad de la química*, Davis Baird, Eric Scerri y Lee McIntyre
II. *La filosofía de la química. De la infancia hacia la madurez*, Joachim Schummer

Segunda parte
LA QUÍMICA Y LA HISTORIA Y LA FILOSOFÍA DE LA CIENCIA

III. *Teoría aristotélica de la reacción y las sustancias químicas*, Paul Needham
IV. *El legado de Kant a la filosofía de la química*, J. van Brakel

Tercera parte
LA QUÍMICA Y LA FILOSOFÍA CONTEMPORÁNEA DE LA CIENCIA

V. *La estructura conceptual de las ciencias. Resurgimiento de la dimensión humana*, Otto Theodor Benfey
VI. *Filosofía normativa y descriptiva de la ciencia y el papelde la química*, Eric R. Scerri
VII. *Cómo fallan los modelos clásicos de explicación en el abordaje de la química. El caso de la modelización molecular*, Johannes Hunger
VIII. *La ética profesional en la ciencia*, Jeffrey Kovac

Cuarta parte
LA QUÍMICA Y LA FÍSICA

IX. *¿Hay causación descendente en química*?, Robin Findlay Hendry
X. *La física en el crisol de la química. Fronteras ontológicas y modelos epistemológicos*, G. K. Vemulapalli

Quinta parte
LA TEORÍA QUÍMICA Y LOS PROBLEMAS
DE SUS FUNDAMENTOS

XI. *Algunas implicaciones filosóficas de la simetría química*,
Joseph E. Earley
XII. *Los sistemas periódicos de moléculas. Presupuestos, problemas y perspectivas*,
Ray Hefferlin
XIII. *Un nuevo paradigma para Schrödinger y Kohn*,
Jack R. Woodyard

Sexta parte
LA QUÍMICA Y SUS HERRAMIENTAS
DE REPRESENTACIÓN

XIV. *Herramientas virtuales. Cuestiones epistemológicas y sociales del diseño de procesos químicos computarizado*,
Ann Johnson
XV. *El espacio en la representación molecular, o cómo representan objetos las imágenes*, S. H. Vollmer
XVI. *Técnicas instrumentales de visualización en la química de superficies*, Daniel Rothbart y John Schreifels

Séptima parte
LA QUÍMICA Y LA ONTOLOGÍA

XVII. *¿Son las clases químicas clases naturales*?, Nalini Bhushan
XVIII. *El agua* no *es H_2O*, Michael Weisberg
XIX. *De la metafísica a la metaquímica*, Alfred Nordmann

PRIMERA PARTE

LA QUÍMICA Y LA FILOSOFÍA DE LA QUÍMICA

I. INTRODUCCIÓN

La invisibilidad de la química

DAVIS BAIRD[*] / ERIC SCERRI[**]
LEE MCINTYRE[***]

No hace mucho, uno de los coordinadores de este libro (Davis Baird) asistió a una conferencia de historiadores de la ciencia y la tecnología, que abarcaban todas las ciencias naturales e ingenierías, y todos los periodos (occidentales), desde la Antigüedad hasta la edad contemporánea. Mientras se discutía un artículo sobre la novedosa historia de la química moderna (del siglo XVIII en adelante), alguien del público afirmó que a la química contemporánea le quedaba ya muy poco por hacer, y que los departamentos universitarios de química de su país tenían dificultades para atraer estudiantes graduados. A Baird esta visión de la química contemporánea le pareció tan singular como increíble, y así lo dijo. En la Universidad de Carolina del Sur (USC, por sus siglas en inglés) —donde él enseña— el número de estudiantes y egresados de la carrera de química es el quíntuple que el de los graduados de física. En esto, la USC no es un caso aislado.

La química es en realidad una disciplina muy vasta y productiva. Joachim Schummer, autor del capítulo II de este volumen, lo expone de manera convincente y sucinta con informes del número de publicaciones en diversos campos. Con un gran total de poco menos de 900 000 artículos listados en las bibliografías de química en el año 2000, la química es más extensa que todas las otras ciencias naturales juntas. Cuando Baird explicó a los historiadores que asistían a la conferencia que la química contemporánea es, en efecto, una disciplina muy activa y productiva, un historiador de las matemáticas que estaba a su lado se volvió hacia él y preguntó con escepticismo:

—¿Pero *qué hacen* tantos estudiantes graduados?

"Hacer, medir y modelar…", habría respondido una colega de Baird, Catherine Murphy, del Departamento de Química y Bioquímica de la USC. De un tiempo a esta parte ella y los colaboradores de su laboratorio se dedican a hacer nanovarillas de plata de diámetros y longitudes estrictamente controlados (Murphy y Jana, 2002). Resulta que la relación entre el largo y el diámetro de las varillas tiene marcados efectos sobre el color de las soluciones hechas con ellas. Las varillas cortas (20 × 30 nm) dan anaranjado, las medianas (20 × 100 nm), rojo, y las largas (20 × 200 nm), azul.[1] Aparte del interés científico intrínseco del fenómeno, se prevén varias aplicaciones. Murphy también estudia cómo se doblan las hebras de ADN, propiedad importante de esta larga molécula lineal, que se enrolla sobre sí misma y forma un bulto minúsculo para "almacenarse", y se desenrolla cuando debe "ser leída".

Ambos proyectos de investigación requieren la tríada de Murphy: hacer, medir y modelar. La investigadora tiene que *hacer* —sintetizar— las nanovarillas, un proceso de múltiples pasos que recordará a los lectores legos esos laboratorios de química universitarios que ejercen rigurosos controles de temperatura, pH, concentración de las soluciones, tiempos de las reacciones, etc. Las varillas sintetizadas tienen que *medirse* —"caracterizarse"—, y para ello Murphy cuenta con el sólido apoyo del Laboratorio de Microscopía Electrónica de la USC. Obtiene entonces varillas de dimensiones conocidas, y sabe que de esta característica dependen varias propiedades, como el color de las soluciones. Pero ¿por qué? En este punto se necesitan *modelos* que describan cómo las

dimensiones de las varillas afectan la absorción de radiación.

No podemos menos que maravillarnos ante la ubicuidad de la química. Todo lo visible ostenta el arte de quien la cultiva. Pinturas, barnices y demás acabados son productos de la química, unos puestos en uso desde hace mucho y (en este sentido) de “escasa tecnología”, y otros nuevos, de “tecnología avanzada”, con nanopartículas que producen sorprendentes efectos visuales y algunas cualidades funcionales más. Hay pilas, bombillas —lo que nos trae a la memoria el reciente libro de Oliver Sacks, *El tío Tungsteno. Recuerdos de un químico precoz* (el tío de Sacks hacía mejores bombillas gracias a la química)— y pantallas de computadora de cristal líquido. Hay incluso química escondida en los chips de silicio, que se hacen por medio de una litografía ultraprecisa. Somos muchos los usuarios de los baratos bolígrafos de tinta mejorada en gel. Y por supuesto, adondequiera que miramos, vemos plásticos. En la película de los sesenta *El graduado*, a Dustin Hoffmann le dicen sobre el futuro: “Una palabra, plásticos”. En este nuevo siglo, quizá la palabra sea “nanomateriales”. En uno u otro caso, es química.

Como el aire que respiramos, la química nos envuelve. Y como ocurre con el aire, damos por sentada la química. No vemos todo el hacer, medir y modelar que se ha llevado el mundo en que vivimos. ¡Qué hacen tantos químicos, en efecto! Con todo, a pesar de su omnipresencia, la química en cierto modo ha seguido siendo mayormente invisible, denigrada por el físico y, hasta no hace mucho, ignorada por el filósofo. A manera de introducción a este libro, consideramos brevemente varias de las causas más importantes de la relativa oscuridad de la química, y cómo el reciente florecimiento del quehacer en filosofía de la química —parte de él documentado en el presente volumen— ha ayudando a que esta ciencia sea más visible y aceptada como sujeto idóneo de reflexión crítica dentro y fuera del laboratorio.[2]

Hasta la década pasada, poco más o menos, los historiadores, y más aún los filósofos, tendían a adoptar grandes visiones teóricas unificadoras en vez de enfoques localizados complejos. La física ofrece espléndidas teorías, y las reflexiones sobre la relatividad, la teoría cuántica y la teoría de la física en general han dominado la filosofía de la ciencia del siglo XX. La química ofrece una multiplicidad de modelos que se basan tanto en la teoría de la física como en generalizaciones experimentales, cada cual según sea pertinente. Sin duda ahí está el sistema periódico, y veremos el camino que Ray Hefferlin emprende en este volumen (capítulo XII) en busca de un sistema periódico de moléculas. Joseph Earley (capítulo XI) aborda maneras en que la teoría de grupos puede hacer avanzar la teoría de la química, y Jack Woodyard (capítulo XIII) desarrolla un modo radicalmente nuevo de interpretar la teoría cuántica. Sin embargo, buena parte de la vida de la química teórica es mejor descrita por el "modelado" de Murphy: intentos limitados de encontrar sentido a fenómenos locales de síntesis.

La teoría, un sustitutivo filosóficamente aceptable de la ficción, nos aleja, como ésta, del mundo material real, del mundo de trabajo cotidiano del químico experimental. Hay en la filosofía una larga tradición que ha intentado negar nuestra naturaleza defectuosa y ver en nosotros —y en nuestro mundo— algo inmaterial más "importante", más "fundamental", acaso un alma, un conjunto de principios esenciales o ambos. La peculiar inversión ontológica de Platón, en la que el mundo material no es sino una copia imperfecta de ese reino de las ideas, acarrea problemas a la filosofía de la química. Ver la química a la luz de la filosofía es quizá como ver nuestra mortalidad. La negación es una estrategia sumamente eficaz.

Los filósofos partidarios de la negación tienen abundantes recursos en que apoyarse. De hecho, la química está al lado de la física y toda su bonita teoría unificadora y fundamental. Entrecerrando los ojos para enfocar mejor, es posible ver la química como física aplicada complicada. Aun en nuestra negación decimos que somos materialistas, pero el mundo material que negamos es el mundo fundamental de la teoría de la física, por lo que la química —en principio al menos— debe ser reductible a la física. Pero lo anterior nunca ha sido mucho más que un artículo de fe. Todos los argumentos a favor de ello han dependido de una imagen muy maquillada de la química. Ha sido suficiente para convencer a los filósofos negadores de que, si se quiere entender la ciencia, bastaría con entender la física. (Para ser justos, ya existe un nutrido grupo de filósofos no partidarios de la negación, y muchos se han dedicado a la filosofía de la biología con particular empeño. Aunque ya hay también un grupo aceptable de filósofos de la química —varios representados en el presente volumen—, sólo muy despacio, y muy recientemente, se ha llegado a acoger este campo como parte del canon de la filosofía de la ciencia.) Aun así, debemos ser claros: antes, para entender la ciencia solía bastar con entender la teoría de la física. Es posible que por medio de esta obra ganemos un entendimiento profundo de los modelos y el modelado químicos, pero los otros dos pies del trípode químico de Murphy, el hacer y el medir, se han perdido. En todo caso, las

preguntas sobre las relaciones entre la química y la física son medulares para entender la química y su invisibilidad.

HACER VISIBLE LA QUÍMICA

Una finalidad central de este libro es seguir aumentando la visibilidad de la química desde la perspectiva filosófica. Ya se han logrado en esto grandes avances, que están muy bien documentados en la contribución de Schummer a este volumen. No obstante, la experiencia entre los historiadores de la ciencia y la tecnología indica que hace falta más trabajo. Algunas de las causas fundamentales de la invisibilidad de la química se pueden encontrar en los temas que hemos considerado brevemente:

i) la materialidad de los objetos de la química;
ii) la centralidad y los medios para conceptualizar esta materialidad;
iii) la naturaleza y el lugar de la teoría, y los temas fundamentales de la química, y
iv) la relación de la química con la física.

En orden inverso, estos temas establecen las bases de las cuatro últimas partes del libro:

Cuarta parte: la química y la física.
Quinta parte: la teoría de la química y el problema de sus fundamentos.
Sexta parte: la química y sus herramientas de representación.
Séptima parte: la química y la ontología.

Antes de estas cuatro partes hay otras tres que sitúan recíprocamente la química, la filosofía de la química y la historia y la filosofía de la ciencia:

Primera parte: la química y la filosofía de la química.
Segunda parte: la química y la historia y la filosofía de la ciencia.
Tercera parte: la química y la actual filosofía de la ciencia.

Juntas, las siete partes se ocupan de la invisibilidad de la química y hacen a ésta más visible. Continuamos esta introducción resumiendo brevemente la obra de los 18 autores de las siete partes.

Nuestra primera tarea es situar la filosofía de la química. Aunque Joachim Schummer adopta una postura más optimista que nuestra apertura, se sorprende ante la incapacidad de los filósofos, hasta tiempos recientes, para abordar la química. Dada la magnitud de esta ciencia, su importancia y su larga y fascinante historia, tal hecho no puede ignorarse. Exige una explicación. Schummer ofrece una excelente perspectiva de las fuerzas disciplinales que han apartado de la química la atención de los filósofos. Cabe señalar que, en efecto, existe una correlación inversa entre la cantidad de atención que los filósofos prestan a un campo de estudio y la extensión de este campo. Los filósofos dedican la máxima atención a su propia historia —que tiene la menor literatura— y la mínima atención a la química, que tiene la mayor literatura.

Schummer hace un hermoso y sucinto recorrido por el pasado, el presente y el futuro de la filosofía de la química. Hubo descuido en el pasado, pero no fue total. Existió una tradición marxista de examen de la química, cultivada vivamente por Friedrich Engels y continuada en los países marxistas. Y cuando los filósofos abandonaron el campo, acudieron a ocupar su sitio químicos, educadores en química y algunos historiadores de la química. Se han escrito tratados filosóficos sobre química. Dos importantes ejemplos de estas contribuciones se consideran en el presente volumen: Aristóteles —por Paul Needham (capítulo III)— y Kant —por Jaap van Brakel (capítulo IV)—. Tal era el estado de descuido parcial de la filosofía de la química durante los años ochenta del siglo XX. Hubo contribuciones importantes —pero aisladas—, ningún debate continuo en la materia y ningún reconocimiento de su importancia por parte de los filósofos de la ciencia.

La situación empezó a cambiar en los años noventa. Esta década vio numerosas conferencias dedicadas exclusivamente a la filosofía de la química, la formación de dos publicaciones periódicas —*Hyle* y *Foundations of Chemistry*—[3] y la creación de la Sociedad Internacional para la Filosofía de la Química (ISPC, por sus siglas en inglés). La ISPC ha auspiciado conferencias internacionales sobre filosofía de la química todos los veranos desde 1997.[4] De hecho, varios artículos presentados en la tercera conferencia, celebrada en 1999 en la USC, forman la base del presente volumen.

Schummer describe el espectro de trabajo que ha constituido este florecimiento de la filosofía de la química. El reduccionismo ha sido un tema central (véanse los capítulos IX y X, de Robin Hendry y G. K. Vemulapalli, respectivamente, en este volumen). También han sido centrales los intentos de desarrollar y adaptar a la química conceptos establecidos de la filosofía de la ciencia: entre otros, el naturalismo, la explicación, la ética profesional y el *thémata* de la historia de la ciencia (véanse los capítulos V a VIII, de Otto Ted Benfey, Eric Scerri, Johannes Hunger y Jeffrey Kovac, respectivamente). Los filósofos han realizado análisis de conceptos químicos fundamentales como elemento, sustancia pura, compuesto y afinidad (véanse los capítulos XVII, de Nalini Bhushan, sobre las especies naturales, y XVIII, de Michael Weisberg, sobre la sustancia pura).

Schummer concluye su aportación especulando cómo debería desarrollarse la filosofía

de la química. Propone una diversidad de caminos de investigación: ¿cuál es la lógica de las relaciones químicas? ¿Qué nos dice el sistema de clasificación química (con más de 20 millones de sustancias conocidas) acerca de la ontología? ¿Qué métodos de descubrimiento son peculiares de los químicos y por qué han tenido tanto éxito estos científicos? ¿Cómo deberíamos replantear la relación entre ciencia y tecnología a la luz de la larga historia de la industria química y sus estrechos nexos con la química académica? Aquí mencionamos sólo algunas de las propuestas de Schummer. La lista completa ofrece un emocionante y persuasivo programa para una filosofía de la química bien desarrollada, madura y que con justa razón obligará a la filosofía a repensarse (véase también el capítulo XIX, de Alfred Nordmann).

Las dos contribuciones de la siguiente parte del volumen se ocupan de dos importantes aportaciones a la relación entre la química y la historia y la filosofía de la ciencia. La primera es el minucioso examen que hace Paul Needham de los puntos de vista de Aristóteles sobre la reacción y la sustancia químicas (capítulo iii). A esto sigue el revelador estudio de Jaap van Brakel de la largamente olvidada *Opus postumum* de Kant, una obra que no recibió atención amplia hasta tiempos recientes. Este olvido permitió que las primeras opiniones de Kant sobre la química como no digna de estudio serio prevalecieran en las consideraciones filosóficas sobre esta ciencia. Aquí se encuentra una de las principales raíces de la invisibilidad filosófica de la química.

El surgimiento del atomismo, gracias a la resurrección que hizo Dalton de algunas antiguas ideas de Demócrito y Leucipo, nos volvió atomistas a todos. Sin embargo, Paul Needham (capítulo III) deja en claro que esta conversión no ha sido ni completa ni indiscutida. Los enfoques alternativos, muy especialmente los de Aristóteles, permanecen arraigados en la teoría de la química contemporánea. Quizá el problema teórico fundamental que la química plantea se refiere a la combinación: dos sustancias distintas pueden combinarse para formar una tercera, que contra lo que cabría esperar también se diferencia de ellas. ¿Por qué ocurre esto? ¿Cómo ocurre? ¿Y qué nos dice sobre nuestra manera de conceptualizar la identidad y las propiedades de una sustancia? Los atomistas parecen tener respuestas precisas a estas preguntas, formuladas con arreglo a supuestos de combinaciones de átomos individuales e indestructibles. Sin embargo, el análisis más cuidadoso de Needham demuestra no sólo que este enfoque es incompleto, sino que las críticas que de él hizo Aristóteles en la Antigüedad han repercutido en el desarrollo de la química moderna. De particular interés aquí es cómo se emplean las propiedades modales. Aristóteles tuvo más cuidado al reconocer y abordar la forma como las propiedades de los elementos aislados "se pierden" cuando éstos se combinan; pero como el análisis puede "restablecerlas", deben de permanecer como una especie de potencialidad. Éste es uno de los varios aspectos importantes de la teoría aristotélica que subsisten en la química moderna (véase el capítulo XIX, de Alfred Nordmann).

En sus *Fundamentos metafísicos de la ciencia natural*, Kant nos dice que "la química no puede llegar a ser más que un simple arte sistemático o una doctrina experimental, mas nunca una ciencia propiamente dicha, porque los principios de la química son meramente empíricos y no admiten presentación *a priori* alguna en la intuición" (véanse, en el capítulo IV, de Jaap van Brakel, la cita y las referencias bibliográficas completas). Tal fue la evaluación crítica —y usamos la palabra tanto en su sentido común como en el "kantiano"— de Kant sobre la química. Y esta evaluación, nos explica Van Brakel, ha tenido tremendas repercusiones. Todavía en 1949, el físico y filósofo de la ciencia Herbert Dingle nos dice que la química no debería figurar en absoluto en la filosofía de la ciencia.[5] Desde el crítico punto de vista de Kant, la química adolecía de dos problemas interrelacionados: no era lo bastante matemática, y como sus leyes no podían descubrirse sino de manera empírica, estarían siempre sujetas al escepticismo "humeano". Sin

embargo, las opiniones de Kant sobre la química evolucionaron en su periodo poscrítico. A Kant le preocupaba en particular que su obra crítica no hubiera comprendido la diversidad de sustancias que los químicos nos presentan, y que su propio concepto metafísico de la materia no abordara bien esta diversidad (*cf.* Needham sobre Aristóteles). Esto constituía un proyecto central de su *Opus postumum*. Por desgracia, esta obra se publicó por primera vez —en versión desordenada y sin editar— en 1804, un siglo después de la muerte del filósofo. La primera traducción al inglés se publicó en 1993. Sin embargo, es aquí donde Kant, plenamente consciente de los revolucionarios avances y controversias que experimentaba la química en manos de Lavoisier y en los años que siguieron, empieza a tratarla como ciencia (aunque sólo fuera tal "impropiamente").

Las cuatro contribuciones de la parte que sigue abordan distintas preocupaciones de larga data en la filosofía de la ciencia y las examinan con el lente de la química. Aunque el tema quizá se ha tratado con menos frecuencia en años recientes, entender que los conceptos cumplen una función central en el desarrollo histórico de la ciencia ha ocupado mucho a los filósofos de ésta. Otto T. (Ted) Benfey aborda el asunto con un artículo que desarrolla la noción de Gerald Holton sobre la función del *thémata* en la historia de la ciencia (Holton, 1988). Eric Scerri continúa con una disertación del papel que las reflexiones sobre la química pueden cumplir en la adquisición de un conocimiento más profundo de la distinción entre lo normativo y lo descriptivo en la filosofía de la ciencia. Johannes Hunger muestra cómo los conceptos tradicionales de explicación fracasan cuando se trasplantan a la química. Por último, Jeffrey Kovac elabora un esquema de aproximación a la ética profesional de los químicos.

Holton es bien conocido por sostener que las preferencias conceptuales generales —por teorías continuas o que son simétricas en el tiempo, por ejemplo— desempeñan una función importante, por encima de la de los datos empíricos, en el desarrollo histórico de la ciencia. Ted Benfey retoma esta idea y desarrolla una tríada de pares de conceptos opuestos que ofrece una útil herramienta conceptual para revisar la historia de la ciencia, y en particular de la química. Sus tres pares son: *1*) tiempo reversible-tiempo irreversible; *2*) continuidad-discontinuidad, y *3*) estructura interna-estructura externa. Ilustra cómo funcionan estos seis conceptos con numerosos ejemplos, muchos de ellos, si bien no todos, tomados de la historia de la química. Así, la ley de los gases perfectos postula la existencia de un cúmulo esencialmente uniforme (o continuo) de partículas de masa puntual (sin considerar estructura interna alguna) que están (reversiblemente) en movimiento. La teoría funciona bien, mas no perfectamente, y sus imperfecciones pueden descubrirse remontándose a los contrarios de los tres conceptos utilizados. En realidad, las partículas no son masas puntuales, sino que ocupan espacio y tienen estructura interna. A baja temperatura no se comportan de manera uniforme, sino que se agregan y presentan discontinuidades. Y, desde luego, de la entropía y la irreversibilidad del tiempo se derivan enigmas esenciales. Armado con sus tres pares de conceptos, Benfey muestra de qué manera tan fundamental distintas tradiciones científicas tienden a preferir determinados conjuntos conceptuales y a centrarse en ellos. Las ciencias mecánicas, que caracterizaron la revolución científica, tendían a insistir en el tiempo reversible, la falta de estructura interna y la discontinuidad. El "organicista" (o "informe de la minoría" de la revolución científica) insiste en los conceptos contrarios: el tiempo unidireccional, la estructura interna y la continuidad. Y de manera más general, muchos debates científicos han sido controversias sobre cómo combinar estos conceptos encontrados.

Durante largo tiempo la filosofía de la ciencia se ha esforzado por entender su postura en relación con las ciencias. ¿Consiste fundamentalmente la filosofía en la lógica —*a priori*— de la ciencia, en dictar a los científicos, sobre bases epistemológicas, lo que

puede y lo que no puede ser un método apropiado? ¿O más bien su papel fundamental es sacar lecciones sobre lo que son métodos apropiados observando cómo opera la ciencia eficaz? Encontramos enfoques más normativos, *a priori*, en Kant, Frege y los positivistas lógicos del siglo XX, y enfoques más descriptivos, *a posteriori*, en Whewell, Mill y el reciente "giro naturalista". Eric Scerri (capítulo VI) nos recuerda esta historia y luego cuenta un poco de la suya y de cómo llegó a aceptar la existencia de los orbitales químicos. La mecánica cuántica nos dice que los orbitales no existen, y al principio Scerri sacó de ello firmes conclusiones normativas, exhortando a los químicos, desde su postura en los fundamentos de la química, a reconocer que estos caballos de vapor químicos eran una ficción. A los químicos les dio igual, y Scerri empezó a reconsiderar la firmeza de su postura normativa. Ha llegado a una especie de término medio inspirado en la opinión del químico Fritz Paneth de que la química debe reconocer que, aun teniendo por base la teoría cuántica, no por ello deja de ser una ciencia autónoma que utiliza conceptos como los orbitales y otros de nivel aún más alto, macroscópicos. Scerri nos muestra que la filosofía de la química puede enseñar a la filosofía de la ciencia a ser tanto descriptiva como normativa. Ambas actitudes —término que Scerri toma conscientemente de Arthur Fine— son importantes en nuestro quehacer filosófico y sin duda también en el de los practicantes de las ciencias.

Johannes Hunger (capítulo VII) se ocupa de otro de los temas normales de la filosofía de la ciencia: la explicación. Examina en detalle varias maneras en que los químicos explican y predicen las propiedades estructurales de las moléculas. Nos informa sobre métodos *ab initio*, modelos empíricos de campos de fuerza y modelos de redes neurales, cada uno de los cuales se ha utilizado para explicar y predecir la estructura molecular. Nos enteramos también de que ninguno de estos enfoques puede incluirse ni en los modelos hipotético-deductivos de explicación ni en los causales. O la química no ofrece explicaciones adecuadas (opción normativa), o nuestros modelos filosóficos de explicación son inadecuados para dar cuenta de la explicación en química (opción descriptiva). Hunger elige la opción descriptiva y esboza un enfoque más pragmático de la explicación, que desarrolla el propuesto por Bas van Fraassen. Una vez más, descubrimos que la filosofía de la ciencia tiene mucho que aprender de la filosofía de la química.

Esta parte termina con un capítulo marcadamente normativo, escrito por un químico, sobre la ética profesional. Jeffrey Kovac sostiene que la ética ocupa un lugar central en la química y, de manera más general, en la ciencia. En cuanto institución que expande nuestro conocimiento, la ciencia depende de la buena naturaleza moral de quienes la practican. Kovac lleva a la práctica estas opiniones, incorporando la ética en sus planes de estudios. Aquí (en el capítulo VIII) expone su visión de la ética de las ciencias. Se basa en el hecho de que las ciencias son profesiones y, como tales, dependen de acuerdos internos con la sociedad en la que están integradas para ofrecer cierta clase de producto a cambio de apoyo y una condición de monopolio como proveedoras de conocimiento científico. Kovac formula la naturaleza de la profesión científica partiendo de los cuatro ideales de la ciencia planteados por Robert Merton:

i) Universalismo. La ciencia persigue la verdad universal con base en criterios de aceptación universal.
ii) Comunismo. El conocimiento científico es un bien público o comunitario.
iii) Desinterés. El progreso de la ciencia es más importante que el de sus practicantes.
iv) Escepticismo organizado. Las pretensiones de conocimiento científico son provisionales, se basan en la información disponible y están sujetas a revisión. (Merton, 1973.)

Kovac concluye el capítulo esbozando un ideal moral de la ciencia. Se centra en dos atributos: *1*) los científicos que integran la profesión científica deben tener el hábito de la verdad. La honradez para consigo mismos, los colegas y la sociedad a la que sirven es esencial para el florecimiento de la ciencia; *2*) los bienes científicos deberían intercambiarse en calidad de donaciones, no como artículos de consumo. El intercambio de donaciones está vinculado con todos los ideales de Merton, pero de manera más estrecha con el comunismo; las donaciones forman parte del modo en que una comunidad de investigadores se establece y se preserva.

Los dos capítulos de la siguiente parte se ocupan de la relación de la química con la física y, en particular, del miedo infundado al reduccionismo. Los capítulos se complementan entre sí. El primero, de Robin Hendry, examina la relación de la química con la física desde el punto de vista filosófico, llevando el bisturí conceptual del analista minucioso al campo minado del reduccionismo y el emergentismo. El segundo, de G. K. Vemulapalli, estudia la relación de la química con la física desde el punto de vista químico, reconociendo la importancia para la química de las leyes fundamentales de la física, sin aceptar en absoluto la autonomía de aquélla.

Es relativamente fácil hablar y gesticular en torno a si la química se reduce o no a la física. Mucho más difícil resulta explicar en detalle cuáles son las condiciones necesarias para que se cumpla el supuesto de que la química se reduce (o no) a la física. Los filósofos manejan el concepto de la superveniencia. En el caso que aquí nos ocupa —la supuesta reducción de la química a la física—, la superveniencia implica que todo cambio químico se acompaña necesariamente de un cambio físico. Esto se confirma casi universalmente; por ejemplo, si dos moléculas son idénticas en todos sus aspectos físicos, tampoco difieren químicamente. Sin embargo, la superveniencia no basta para reducir la química a la física. Podría haber una “causalidad descendente”, donde sean hechos y leyes químicos los que motiven hechos y leyes físicos, y no a la inversa. Robin Hendry (capítulo IX) sostiene que quienes se adhieren a la reductibilidad de la química a la física no han descartado la posibilidad de la causalidad descendente, y además, presenta pruebas sustanciales del modo en que los químicos construyen y esgrimen las descripciones moleculares de la mecánica cuántica a favor de la causalidad descendente. Las descripciones moleculares de la mecánica cuántica que tienen capacidad explicativa y descriptiva se construyen a partir de consideraciones y pruebas químicas, no físicas. Aquí, en términos precisos, vemos que la química superviene a la física, mas no por ello deja de ser autónoma, irreductible a la física.

Entonces, si la química no es reductible a la física, ¿cuál es la relación entre ambas disciplinas? Ésta es la pregunta que G. K. Vemulapalli aborda en el capítulo X. Con base en su vasta experiencia en la práctica de la química, Vemulapalli examina el uso que hacen los químicos de las teorías físicas, cómo desarrollan teorías químicas que están por encima de las teorías físicas, y cómo se relacionan estas dos áreas teóricas. Muchos ejemplos dejan en claro que los avances de la física influyen profundamente en la química. Las masas molares relativas —uno de los varios ejemplos que presenta Vemulapalli— hoy se miden sistemáticamente por el uso combinado de la espectrometría de masas y la ley de los gases perfectos. También queda claro, por la abundancia de ejemplos, que los avances de la química influyen en la física. Los trabajos de Faraday en electroquímica llevaron a que Stoney introdujera el concepto de electrón, y el estudio de Nernst de los equilibrios de baja temperatura desembocó en la tercera ley de la termodinámica. El desarrollo de la teoría cuántica ha desempeñado un papel decisivo en la comprensión química de los enlaces. Sin embargo, y éste es uno de los principales

puntos de Vemulapalli, los químicos no se limitan, *ni pueden* hacerlo, a incluir situaciones químicas en la ecuación de Schrödinger y obtener resultados útiles. Deben enriquecer la teoría física estricta con conceptos químicos; energías y longitudes de enlace, por ejemplo. Como lo expresa Vemulapalli, las leyes físicas ofrecen nociones conceptuales fundamentales y condiciones limitantes de lo que es posible; los químicos tienen que sumar su contribución para averiguar cómo se comportan las especies químicas propiamente dichas.

Hendry y Vemulapalli allanan el camino para los estudios que se realizan en la siguiente parte. Las teorías fundamentales de la física, como la mecánica cuántica, plantean difíciles cuestiones esenciales que han exigido los esfuerzos de muchas mentes destacadas en los campos de la física y la filosofía de la física. Dado que la química no es reductible a la física, hay un espacio de autonomía para la teoría de la química y para asuntos fundamentales de ésta. En esta parte se abordan tres de tales asuntos. Joseph Earley examina el papel de la simetría en la química y arguye a favor de que sus colegas químicos presten más atención a la teoría de grupos. Ray Hefferlin busca extender de los elementos a los compuestos la idea de ley periódica. Jack Woodyard se ocupa de los obstáculos fundamentales que impiden una aplicación más sencilla de la teoría cuántica a las moléculas.

Joseph Earley (capítulo XI) resalta la importancia de la teoría de grupos tanto en química como en la filosofía de la química. Muestra cómo los conceptos teóricos de los grupos pueden arrojar una luz necesaria sobre varios problemas fundamentales de la química; por ejemplo, el de la combinación, que ya hemos visto (capítulos III y IV, de Paul Needham y Jaap van Brakel, respectivamente). Otro ejemplo es el problema de la reducción y la emergencia, que también hemos visto (capítulos VI, IX y X, de Eric Scerri, Robin Hendry y G. K. Vemulapalli, en ese orden). Earley examina las aportaciones de la filosofía a la mereología (el estudio de las partes y los todos). Muestra que la mereología, en su estado actual de desarrollo, es incapaz de abordar las combinaciones químicas porque, en general, las propiedades de los elementos solos se modifican considerablemente cuando éstos se combinan. Earley señala que la teoría de grupos, en particular el concepto de cerramiento en una operación de grupos, proporciona el aparato conceptual necesario para que la mereología avance y pueda tratar la combinación química. Agrega que la teoría de grupos facilita un medio conceptualmente agudo para formular cómo un sistema más complejo puede emerger de uno más simple, sin dejar de supervenir a él: justamente la situación que Hendry plantea con respecto a la química y la física.

La tabla periódica de los elementos de Dmitri Ivánovich Mendeléiev reviste una importancia extraordinaria para la química y la filosofía de la química. Proporciona un poderoso principio organizador que ha desembocado en el descubrimiento de elementos nuevos e insospechados y, hasta tiempos recientes, ha sido uno de los mejores ejemplos de ley genuinamente química. Se han hecho intentos —no totalmente afortunados— de explicar la ley periódica con la teoría cuántica (Scerri, 2003b), pero aquélla sigue siendo, como la teoría darwiniana de la selección natural en biología, una piedra angular de la química. Sería espectacular que se pudiera desarrollar un sistema periódico de las moléculas. Ayudaría a organizar la tremenda complejidad que constituye el inmenso número de especies químicas conocidas, y también a predecir los nuevos compuestos que podrían sintetizarse y desarrollarse con fines prácticos. Asimismo, sería un maravilloso ejemplo más de la autonomía de la química. Ray Hefferlin (capítulo XII) ha

sido el principal actor en dos décadas de esfuerzos para desarrollar tal sistema de moléculas. Aquí ofrece un panorama de la historia de estos esfuerzos, sus dificultades y expectativas.

En nuestro último capítulo sobre las cuestiones teóricas y fundamentales de la química (capítulo XIII), Jack Woodyard ataca constructivamente el modo forzado en que la teoría cuántica clásica se hizo entrar en la química cuántica. Woodyard propone un cambio fundamental: abandonar las representaciones del espacio de Hilbert y sustituirlas con un espacio tridimensional complejo en el que interactúan "ondas de materia". Ya hemos visto que la aplicación de la teoría cuántica a la química no es sencilla y requiere aportaciones adicionales de información experimental y relativa a técnicas de aproximación que funcionen, pero que no pueden estar motivadas por razones teóricas (capítulos VI, VII, IX y X, de Eric Scerri, Johannes Hunger, Robin Hendry y G. K. Vemulapalli, respectivamente). Woodyard presenta pruebas adicionales de que este enfoque tradicional funciona sólo con el uso de numerosos paliativos para ocultar hipótesis conocidamente erróneas. La teoría no ofrece ningún medio no improvisado para visualizar moléculas, y lo que es quizá más condenatorio, como se calculan más términos en la serie teórica, los resultados se apartan más de los valores experimentales. Woodyard ofrece una teoría alternativa que conserva la parte central, fundamentalmente correcta, de la teoría cuántica, pero la desarrolla como una teoría de ondas de materia en un espacio tridimensional, y muestra que su alternativa ofrece resultados que concuerdan con los experimentos mejor que el enfoque convencional. Woodyard está consciente de que un cambio fundamental como el que él propone casi nunca se adopta sin resistencia para remplazar el dogma vigente, y ofrece cautivadoras intuiciones de la ciencia revolucionaria, desde su perspectiva de revolucionario.

Las cuestiones relativas a la teoría de la química y su relación con la teoría de la física son centrales para la filosofía de la química, pero no abarcan todo el campo. La manera en que la química se ocupa de representar sus objetos es de suma importancia, tanto para el ejercicio de la química como para nuestro entendimiento filosófico de ella. Esta parte incluye tres capítulos sobre las herramientas de representación de la química. En el primero, Ann Johnson describe la introducción de las computadoras en la ingeniería química. Esto es importante porque el surgimiento del diseño asistido por computadora cambió el campo radicalmente —de manera inconmensurable—. La aportación de Johnson también es importante porque nos recuerda que la filosofía de la química no puede ignorar su finalidad tecnológica: la ingeniería química. En el siguiente capítulo, Sara Vollmer considera herramientas aparentemente más simples: los modos de representación de las especies químicas "en papel". Su disertación sondea las diferencias entre representaciones gráficas y lingüísticas. Por último, el dúo de Daniel Rothbart, filósofo, y John Schreifels, químico, examina los presupuestos que entran en el diseño de instrumentos analíticos.

El relato de Ann Johnson sobre la introducción de las computadoras en la práctica de la ingeniería química (capítulo XIV) nos recuerda varios aspectos importantes de la ciencia. Las herramientas pueden dar resultados extraordinarios. Además, se introducen a través de comunidades de practicantes, y éstas plantean problemas específicos —de hecho, se caracterizan por sus problemas, dice Johnson— en su trabajo. Al final de la narración, hacia 1990, el trabajo hecho entonces por un ingeniero químico había cambiado radicalmente con respecto al que se hacía en 1950. Cabía esperar algunos cambios (aunque quizá sólo en retrospectiva). Buena parte de la ingeniería química implica trabajar con ecuaciones diferenciales parciales. Antes de las computadoras, que pueden producir aproximaciones numéricas iterativamente, un ingeniero químico tenía que trabajar con ecuaciones analíticamente solubles. Las computadoras quitan esta limitación, pero, desde luego, a su vez producen restricciones. Al principio se necesitaban programadores especializados. Esto ocasionó un problema disciplinal, que se resolvió con el tiempo incorporando la programación de computadoras en el plan de estudios de los ingenieros químicos. Cuando se introdujeron, las computadoras se utilizaron para procesar grandes cantidades de datos y operaciones numéricas, mientras que la práctica contigua de la ingeniería siguió poco más o menos igual. Sin embargo, al comprenderse mejor las posibilidades de la herramienta, la práctica misma cambió. Se desarrollaron las computadoras para simular operaciones, y esto abrió (y a la vez cerró) a los ingenieros químicos todo un nuevo campo de operaciones. Al final, todo cambió en el ámbito de la ingeniería química: los problemas, las soluciones aceptables, el aprendizaje necesario, las prácticas cotidianas y el entorno profesional, lo que produjo una especie de inconmensurabilidad que las historias del cambio de teorías omiten.

La aportación de Sara Vollmer (capítulo XV) se refiere a lo que parece una herramienta química mucho más simple: la manera en que representamos las especies químicas en

papel. Vollmer contrasta el método de John Dalton con el de Jakob Berzelius. Berzelius desarrolló una notación precursora de la hoy común del tipo "H_2O", en la que los compuestos se representan según los números molares relativos de sus constituyentes elementales. El método de Dalton era más gráfico. El trióxido de azufre (como Dalton entendía el ácido sulfúrico) se representaba como un círculo central (con algunas marcas convencionales que lo identificaban como azufre) rodeado de otros tres círculos de "oxígeno", un método que anuncia diversas representaciones de "rayas y ruedas" utilizadas hoy. El propósito de Vollmer aquí es dilucidar cómo las representaciones gráficas, como la de Dalton, difieren de la notación más lingüística de Berzelius. La respuesta radica en algún aspecto de la geometría que la representación comparte con su objeto, aunque, sobre todo tratándose de la ilusión de tres dimensiones en una superficie bidimensional, explicar esta respuesta requiere una buena dosis de cuidado.

El último capítulo de esta parte combina el interés de Johnson en el instrumental y en cómo interactúan con él las comunidades, y el interés de Vollmer en la representación gráfica. Daniel Rothbart y John Schreifels (capítulo XVI) se ocupan de varios instrumentos, desde los microscopios de Hooke hasta el microscopio de barrido de efecto túnel de Binning y Rohrer. Se proponen mostrar que los instrumentos no son dispositivos "transparentes" que se limiten a "abrir una ventana" en una parte del mundo que de otra manera sería inaccesible. Los instrumentos son dispositivos activos en muchos sentidos. Deben hacerse, y esto supone que dependemos del conjunto de materiales y técnicas hoy disponibles para ello. Sin embargo, antes incluso de manejar el torno tenemos que diseñar, y en este punto Rothbart y Schreifels enriquecen la disertación de Vollmer sobre la representación gráfica. Rothbart y Schreifels conciben los diseños de instrumentos como experimentos de pensamiento en los que podemos, mientras observamos los diagramas, considerar las posibilidades de interacción del instrumento con la muestra. Esto nos recuerda que el paso a través de un instrumento de la muestra a la observación es todo menos pasivo. Los instrumentos sondean las muestras, generan una señal y la van modificando a todo lo largo del camino hasta arrojar información sobre aquéllas. Rothbart y Schreifels sostienen que, en virtud de las operaciones mecánicas que comparten los instrumentos y la naturaleza, podemos confiar en lo que éstos nos enseñan. Los autores extraen una enseñanza moral tanto epistemológica —sólo los instrumentos que comparten adecuadamente sus modos de operación con sus objetos producen conocimiento verdadero— como ontológica: las operaciones del mundo son de la misma clase que las operaciones de los instrumentos. Hablar de un "universo con mecanismo de relojería" es más que una simple analogía.

Las especulaciones ontológicas de Rothbart y Schreifels nos llevan a la última parte del libro, donde encontramos las lecciones más profundas de la química: la ontología. Los tres capítulos tratan de las lecciones que la química ofrece para nuestro entendimiento de la sustancia. Y, como nos recuerda Michael Weisberg, la química es la ciencia de la estructura y reactividad de las sustancias. Entonces no sorprende que haya mucho que aprender aquí. Los dos primeros capítulos —XVII y XVIII, de Nalini Bhushan y Michael Weisberg— se refieren a las lecciones de la química sobre las especies naturales. En la literatura filosófica, escrita por filósofos que tenían un conocimiento a lo sumo superficial de la química, con frecuencia se cita esta ciencia como fuente abundante de especies naturales paradigmáticas. ¿No es el agua H_2O, después de todo? Bhushan y Weisberg aportan separadamente más sofisticación y escepticismo químicos a esta noción simplista de las especies naturales. El agua no es (simplemente) H_2O. Alfred Nordmann, en el capítulo XIX, se inspira en el trabajo de Émile Meyerson y Gaston Bachelard —dos filósofos con algún conocimiento químico auténtico— para formular una noción de sustancia más general, rica y metaquímica. Esta noción metaquímica de sustancia resulta mejor que la noción metafísica que lleva siglos plagándonos de seudoproblemas filosóficos.

Nalini Bhushan sostiene que las especies químicas no son especies naturales. No lo son porque muchas especies químicas son creadas por el hombre —sintetizadas— y no existen "en la naturaleza". Sin embargo, también puede decirse que no son naturales en el sentido más importante de que la química no ofrece una manera unívoca de dividir las sustancias (sintéticas o "naturales") en categorías de especie. El modo en que un químico clasifica las especies tiene que ver con necesidades químicas y funcionales locales, y responde a estas necesidades. En algunos casos, tener determinada clase de reactividad es lo que motiva la clasificación; en otros, los aspectos estructurales guían la clasificación, y en otros más convienen clasificaciones distintas.

El ejemplo del agua de Michael Weisberg (capítulo XVIII) ayuda a demostrar lo anterior. El agua "común", si bien purificada (¿pero cuán purificada?), que se encuentra "naturalmente" en la Tierra contiene isómeros isotópicos peculiares en porcentajes predecibles. Aunque en la composición de la mayor parte del agua entra el hidrógeno "común" "de un protón y un electrón", un pequeño porcentaje contiene un isómero isotópico más pesado del hidrógeno: el de "un protón, *un neutrón* y un electrón", el "deuterio" o "D". Representamos el "agua pesada" como HDO en vez de H_2O. Para muchos efectos, el agua de la que queremos hablar *debe* contener los porcentajes normales de H_2O común y su forma "pesada" HDO. Propiedades tales como el punto de congelación y la viscosidad dependen de esta "especie natural de agua", que contiene los porcentajes de isómeros isotópicos "que se presentan en la naturaleza". A veces es de capital importancia distinguir entre estos isómeros isotópicos, y separarlos en el laboratorio, preparando muestras isotópicamente puras de las diversas "especies" de

agua. El agua pesada se emplea como moderador en algunos reactores nucleares, pero a nadie le convendría beber de ella.

Tanto Bhushan como Weisberg se esfuerzan en señalar que las especies químicas son más complicadas de lo que podrían pensar (o desear) los filósofos sin instrucción química. Uno y otro llevan estos hechos de la química en direcciones un tanto distintas. Bhushan sostiene que las conclusiones realistas a las que llevan los discursos químicamente ignorantes sobre las especies naturales no están respaldadas por la química genuina. En vez de ello, Bhushan es partidaria de un enfoque "particular" más contextualizado de las especies químicas, que descalifica los puntos de vista ontológicos de Nancy Cartwright (Cartwright, 1994, 1999). La postura es realista, y las especies naturales empleadas "existen realmente", pero sólo en formas construidas localmente —quizá sintetizadas—, no teórica y globalmente. Weisberg alega que las obras de filosofía del lenguaje que asocian causalmente la designación de esencias identificadas en un acto inicial de nombrar (Kripke, 1980; Putnam, 1975) descansan sobre un supuesto falso. Este supuesto es lo que Weisberg llama el "principio de coordinación", y afirma que el habla común sobre especies (por ejemplo, el término "agua") puede asociarse con el discurso científico sobre especies (por ejemplo, el término H_2O), donde descubrimos en realidad la naturaleza de estas esencias. Sin embargo, como hemos visto, el agua no es H_2O, y el principio de coordinación no puede ser verdadero. Weisberg nos exhorta a considerar un mejor principio de coordinación que permita que designaciones como "agua" respondan al contexto del uso. Cuando un invitado pide un vaso de agua, se trata del grueso común del líquido, compuesto de porcentajes normales de isómeros isotópicos al que se refiere el término "agua" (sin duda, por lo general de manera inconsciente o aun metafísica). Cuando un ingeniero nuclear pide que se abra la válvula del moderador de agua, "agua" se refiere a "agua pesada".

Así pues, la química nos enseña que las especies son más complicadas de lo que pensábamos. Alfred Nordmann (capítulo XIX) lleva más lejos esta conclusión: la noción misma de sustancia es más complicada de lo que pensábamos. Nuestra noción "metafísica" de sustancia se centra exclusivamente en el milenario "problema del cambio": ¿qué cosa permanece igual al cabo del cambio? Sin embargo, para entender el mundo material en que vivimos necesitamos una noción más rica de sustancia, una noción que responda a cómo llegan a ser las sustancias, cómo las identificamos en cuanto tales y cómo las proyectamos hacia el futuro en un mundo que está en constante proceso de construcción. La metaquímica nos da esta noción de sustancia. Sin negar la noción metafísica de sustancia, la metaquímica ofrece una noción más amplia que abarca la noción metafísica de "subestrato", pero le agrega elementos importantes. Nordmann describe la tríada de Bachelard: "sub-stancia" —aquello que subyace a los fenómenos observables—; "sur-stancia" —aquello que emerge en nuestro envolvimiento con el mundo material—, y "ex-stancia" —ese exceso de significado que tienen los conceptos de sustancia y que nos permite proyectar las sustancias más allá de su contexto de creación—. Nordmann asocia este trabajo de Bachelard con una obra más reciente de Bruno Latour, donde la atención se centra en la actividad que los científicos realizan para

generar sustancias. También lo asocia con la noción de Peirce de que lo real es aquello a lo que se llega al final de la investigación. Aunque empecemos con una noción puramente metafísica de sustancia, terminamos con una verdadera noción metaquímica.

Como se ve, aun por medio de este breve resumen de los artículos contenidos en el presente volumen, la filosofía de la química ya es una disciplina bien establecida. Después de los previsibles dolores de crecimiento durante las últimas décadas, sentimos que el campo ya está lo bastante maduro para ofrecer una selección de obras de calidad, a tal grado que el subtítulo del volumen —*Síntesis de una nueva disciplina*— esté a la altura de su promesa. Esto, por supuesto, no puede juzgarse por los méritos de ningún argumento *a priori* sobre la necesidad de una nueva disciplina, sino únicamente por el contenido de las obras que ya existen sobre este campo. A este fin queremos encaminar al lector en las páginas que siguen.

BIBLIOGRAFÍA

Bhushan, N., y S. Rosenfeld, *Of Minds and Molecules*, Oxford University Press, Oxford, 2000.

Cartwright, N., *Nature's Capacities and Their Measurement*, Oxford University Press, Oxford, 1994.

————, *The Dappled World: A Study of the Boundaries of Science*, Oxford University Press, Oxford, 1999.

Dingle, H., y G. R. Martin, *Chemistry and Beyond: Collected Essays of F. A. Paneth*, Interscience, Nueva York, 1964.

Holton, G., *Thematic Origins of Scientific Thought: Kepler to Einstein*, 2ª ed., Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1988.

Kripke, S., *Naming and Necessity*, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1980.

Merton, R. K., "The Normative Structure of Science", en R. K. Merton (ed.), *The Sociology of Science*, University of Chicago Press, Chicago, 1973, pp. 267-278.

Murphy, C., "Nanocubes and Nanoboxes", *Science*, núm. 298 (13 de diciembre de 2002), pp. 2139-2141.

————, y N. Jana, "Controlling the Aspect Ratio of Inorganic Nanorods and Nanowires", *Advanced Materials*, vol. 14, núm. 1, 2002, pp. 80-82.

Putnam, H., "The Meaning of Meaning", en *Mind, Language and Reality, Collected Papers*, vol. 2, Cambridge University Press, Cambridge, 1975.

Scerri, E., "Editorial 13", *Foundations of Chemistry*, núm. 5, 2003(a), pp. 1-6.

————, "How Ab Initio is Ab Initio Quantum Chemistry", *Foundations of Chemistry*, núm. 6, 2003(b), pp. 93-116.

Schummer, J., *Realismus und Chemie. Philosophische Untersuchungen der Wissenschaft von den Stoffen*, Königshausen & Neumann, Würzburg, 1996.

Van Brakel, J., "On the Neglect of Philosophy of Chemistry", *Foundations of Chemistry*, núm. 1, 1999, pp. 111-174.

————, *Philosophy of Chemistry*, Leuven University Press, Lovaina, 2000.

---

[*] South Carolina Honors College, Universidad de Carolina del Sur.

[**] Departamento de Química y Bioquímica, Universidad de California en Los Ángeles.

[***] Centro para la Filosofía y la Historia de la Ciencia, Universidad de Boston.

[1] Muchos institutos de investigación, todos ellos con grandes contingentes de químicos, han acometido con entusiasmo el estudio de la nanociencia. En la Universidad de California en Los Ángeles (UCLA), por ejemplo, se fundó recientemente el California Nano Systems Institute (CNSI), donde trabaja otro de los coordinadores de este volumen (Eric Scerri), tras la concesión de un subsidio de aproximadamente 50 millones de dólares.

[2] Ni en el ámbito de los libros de divulgación científica parece que la química esté suficientemente representada; la física y la biología ocupan mucho más espacio en los anaqueles. Entre las excepciones se cuentan los libros sobre la tabla periódica y las obras de Peter Atkins, Philip Ball y Roald Hoffmann, que han hecho denodados esfuerzos por popularizar la química.

[3] Los sitios web de los dos publicaciones son http://www.hyle.org/index.html y http://www.kluweronline.com/issn/1386-4238, respectivamente.

[4] Otras varias conferencias anteriores tuvieron lugar en Alemania y el Reino Unido, incluida una en la London School of Economics en marzo de 1994, y la primera International Summer School in Philosophy of

Chemistry, en julio del mismo año (Scerri, 2003a). Se ha publicado un estudio detallado de la historia de la disciplina (Van Brakel, 1999) y también han aparecido varios libros de filosofía de la química (Bhushan y Rosenfeld, 2000; Schummer, 1996; Van Brakel, 2000).

[5] Aun así, Dingle, fundador del *British Journal for the Philosophy of Science*, se interesó en la química lo suficiente como para coeditar los ensayos filosóficos del químico Fritz Paneth (Dingle y Martin, 1964).

II. LA FILOSOFÍA DE LA QUÍMICA

De la infancia hacia la madurez

Joachim Schummer[*]

Introducción

Ha pasado la época de quejarse del descuido en que se tenía a la filosofía de la química. Con más de 700 disertaciones y cerca de 40 monografías y colecciones aparecidas desde 1990, éste es uno de los campos de la filosofía de más rápido crecimiento.[1] Quizá demasiado rápido, pues empieza a serles difícil a los entendidos mantenerse al día, problemático a los principiantes iniciar su estudio y prácticamente imposible a los extraños sondear las principales ideas. En cuanto a mí, tras dedicarme a este campo desde fines de los años ochenta, me parece oportuno hacer una pausa y escribir un ensayo del tipo "¿De dónde venimos? ¿Dónde estamos? ¿A dónde deberíamos ir?"[2]

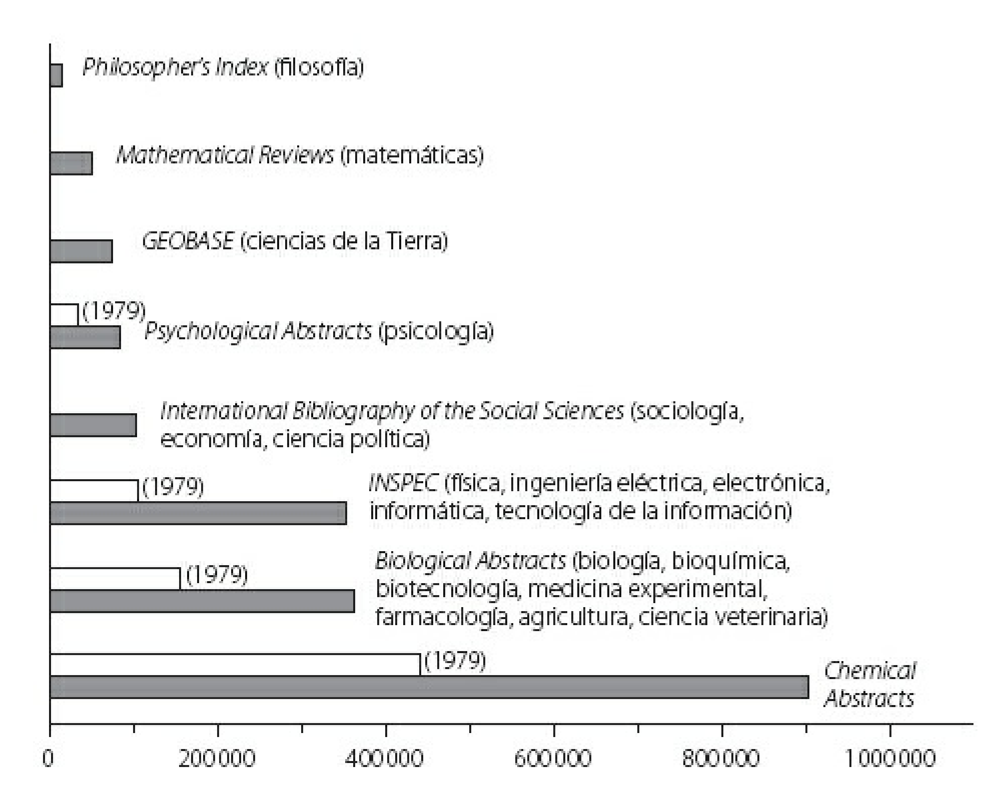
Así, el presente capítulo se divide en tres partes. Venimos del descuido filosófico —es decir, prácticamente de ningún lugar—, lo que trato de explicar en la primera parte recordando la historia disciplinar de la filosofía. Hoy nos encontramos en un estado de crecimiento rápido, de publicación prolífica, a la que doy alguna estructura en la segunda parte, señalando los temas y tendencias más importantes.[3] "¿A dónde deberíamos ir?" es una pregunta a la que no puedo dar más que una respuesta personal, basada en un juicio pragmático de los temas de la infancia y la madurez que intento justificar en la tercera parte.

Un principio general sobre el interés de los filósofos por las ciencias

Permítaseme comenzar con una mirada a la cantidad de literatura publicada en las diversas ciencias. Esta información ofrece un buen cálculo del tamaño relativo de las disciplinas, a diferencia de su cobertura mediática y otras referencias a la ciencia. La gráfica II.1 presenta el número de textos nuevos (libros, disertaciones, patentes, etc.) listados en los índices de las más importantes publicaciones periódicas de resúmenes en 2000 y 1979.

Llama la atención, ante todo, que la química no sólo es la disciplina de mayor tamaño, sino que supera a todas las demás ciencias naturales juntas, incluidas sus florecientes tecnologías asociadas. La base de datos *INSPEC* (antes curiosamente llamada *Science Abstracts*) comprende, además de física, "ingeniería eléctrica, electrónica, informática y tecnología de la información", así como "una porción considerable de áreas como ciencia de materiales, oceanografía, ingeniería nuclear, geofísica, ingeniería biomédica y biofísica".[4] Sin embargo, pese al rápido crecimiento de la informática y la tecnología de la información, todo lo anterior representa menos de 40% del volumen de publicación de *Chemical Abstracts*. Además, la base *Biological Abstracts* pudo florecer enormemente durante la década pasada al incluir, además de biología, "bioquímica, biotecnología, medicina preclínica y experimental, farmacología, agricultura y ciencia veterinaria".[5] Pese al auge de las ciencias biomédicas y su parcial superposición con la química, la base representa apenas 40% de *Chemical Abstracts*. Las ciencias de la Tierra, equivalentes a menos de la décima parte de la química, son aún más pequeñas que las ciencias sociales y la psicología.

La supremacía cuantitativa de la química no es un fenómeno nuevo. Al contrario, muchas de las otras publicaciones periódicas de resúmenes crecieron más deprisa que *Chemical Abstracts* durante las últimas tres o cuatro décadas, por varias razones. Se beneficiaron de las tendencias en auge, como *Psychological Abstracts* de la psicología cognitiva; absorbieron nuevos campos, como hizo *Science Abstracts* con la informática y la tecnología de la información para terminar siendo *INSPEC*, o aumentaron la superposición parcial con la química, como *Biological Abstracts* hizo al incorporar la bioquímica. En 1979, cuando ningún filósofo de la ciencia sospechaba siquiera la existencia de la filosofía de la química, *Chemical Abstracts* era más de cuatro veces mayor que *Science Abstracts* (física) y unas tres veces mayor que *Biological Abstracts*. Si esos filósofos hubieran entrado sin prejuicios en los laboratorios, se habrían topado con la química casi por todas partes.



GRÁFICA II.1. *Número de textos nuevos (ensayos, patentes, libros, etc.) listados en los índices de las más importantes publicaciones periódicas de resúmenes en 2000 y 1979. Los datos de 2000 son de los sitios web de las publicaciones (en miles: PI, 10; MR, 47; GB, 74; PA, 80; IBSS, 100; INSPEC, 350; BA, 360; CA, 899); los datos de 1979 son de Tague* et al. *(1981*).

Hoy en día los filósofos en conjunto escriben tantas publicaciones en un año como los químicos en cuatro días. Irónicamente, la cifra revela un principio general sobre el interés de los filósofos por las ciencias: *cuanto menor es la disciplina, tanto más escriben los filósofos sobre ella*, a excepción de las ciencias de la Tierra. En orden aproximado, los filósofos escriben:

1) sobre filosofía, como por ejemplo historia de la filosofía o, para ser más preciso, sobre lo que los filósofos clásicos publicaron o dejaron sin publicar;
2) sobre matemáticas, como lógica matemática y filosofía de la física matemática (“filosofía de la ciencia”);
3) sobre psicología, como filosofía de la mente o epistemología naturalizada;
4) sobre las ciencias sociales, como la filosofía social y política, y filosofía de las ciencias sociales;
5) sobre física experimental, como “filosofía de la ciencia”;
6) sobre biología, como filosofía de la biología, y
7) en mínima medida, sobre química.

Así pues, si los filósofos producen ideas generales sobre la “ciencia”, hay buenas razones para desconfiar. Por otra parte, si en verdad se quiere entender las ciencias

naturales, hay buenas razones para empezar por la química.

Se han propuesto muchas explicaciones de por qué los filósofos han descuidado la química tan obstinadamente, casi como si no existiera. ¿Es la falta de "grandes preguntas" de la química, su estrecha relación con la tecnología o el históricamente arraigado pragmatismo de los químicos y su falta de interés por cuestiones metafísicas? ¿O será el principal problema la supuesta reducción de la química a la física (mecánica cuántica), de modo que, si la química no fuera más que una rama aplicada de la física, no habría una verdadera consideración filosófica de ella?

Lo que todos estos supuestos tienen en común es que intentan explicar el descuido de los filósofos en función de la química, como si esta ciencia tuviera la culpa. Si hubiera sólo un poco de verdad en nuestro principio general, lo que exigiría una explicación es el extraño orden de los intereses de los filósofos. En tal explicación, el descuido de la química resultaría ser un simple caso especial, aunque extremo. No me propongo dar una explicación completa, sino algunos indicios que ofrece la historia *disciplinar* de la filosofía. Aunque podemos, en retrospectiva, construir una historia de textos a los que hoy en día llamamos filosofía, hay lo que se quiera menos una historia continua de una disciplina llamada así, en el sentido de historia de una profesión. Las preferencias temáticas de los filósofos de hoy reflejan lo asombrosamente joven e inadecuada que es la historia de su disciplina.

La relación con las matemáticas se remonta a una época, todavía a principios del siglo XIX, en que "filosofía" no era más que el nombre genérico de todas las artes y ciencias reunidas en las facultades de filosofía, de las cuales las artes matemáticas constituían la mayor parte desde tiempos medievales. Así, los profesores de las facultades de filosofía, es decir, los "filósofos" profesionales, tenían que enseñar muchas matemáticas, incluidas matemáticas aplicadas como mecánica y óptica geométrica, que a mediados del siglo XIX entrarían a formar parte de la física moderna. Otras ciencias naturales como la química y la biología (historia natural) se enseñaban sobre todo en las facultades superiores de medicina y, por lo mismo, permanecieron más bien ajenas a los filósofos hasta el día de hoy. Cuando, durante el siglo XIX, la mayoría de las disciplinas, incluida la física moderna, maduraron hasta salir del ámbito de la filosofía en el sentido genérico, la psicología y las ciencias sociales ("filosofía moral") permanecieron bajo la etiqueta de "filosofía". Su separación definitiva no ocurrió mucho antes de principios del siglo XX. En términos generales, cuanto más tarde se independizó de la filosofía (en el sentido genérico) una disciplina, tanto más pequeña es ahora y más estrechos son sus vínculos históricos con los filósofos actuales, de acuerdo con nuestro principio general.

La separación de las disciplinas produjo una crisis seria en torno a la pregunta de si quedan temas para la filosofía como disciplina en sí misma. Aunque la mayoría de las disciplinas se independizaron definiendo un tema propio que investigar por métodos empíricos, los filósofos que quedaban se negaron a hacer lo mismo. Muchos recogieron las ideas dieciochescas de Kant (propuestas antes de la formación disciplinar de las ciencias modernas), quien había reservado fundamentos metafísicos y epistemológicos de

las ciencias matemáticas como temas filosóficos genuinos, además de la ética y la estética. Eso les permitió, ciertamente, reconstruir una tradición que se remonta a los principios de la era moderna.

Si examinamos la tradición que la moderna filosofía de la ciencia considera propia, resulta ser una tradición sumamente parcial, centrada en la mecánica que antes se enseñaba en las facultades de filosofía con el nombre de matemáticas "mixtas" o "aplicadas". Unos cuantos puntos podrían ilustrar esto. Primero, el surgimiento de la primitiva epistemología moderna, tanto en su rama racionalista como en la empirista, con excepción de Francis Bacon, tuvo una relación estrecha con el surgimiento de la filosofía mecánica, que se oponía férreamente a varias clases de filosofía química. Segundo, como las raíces teóricas de la física moderna están en la mecánica analítica o "racional", que todavía a principios del siglo XIX no pertenecía a las ciencias físicas, sino a las matemáticas, los debates filosóficos sobre el "método científico" giraban, en gran medida, en torno a si establecer la mecánica como ciencia *física*. El anterior principio de Kant de que, a diferencia de las ciencias experimentales, sólo la mecánica es una ciencia propiamente dicha porque tiene fundamentos *a priori* en las matemáticas, representó un temprano e influyente prejuicio favorable a incluirla en la física. Lo anterior propició que los kantianos se centraran en la mecánica y se olvidaran de las demás ciencias. Por último, durante la fase decisiva de profesionalización de la filosofía de la ciencia en el siglo XX, fueron ante todo los físicos teóricos interesados en filosofía quienes configuraron el campo con sus numerosas disertaciones sobre los enigmas de la mecánica cuántica y la teoría de la relatividad. Pronto ocuparon la mayoría de las recién creadas cátedras de filosofía de la ciencia, situación que no ha cambiado mucho desde entonces.

Su afinidad con la física teórica, antigua pero históricamente incidental, hizo que los "filósofos de la ciencia" descuidaran no sólo la química, sino todas las demás ramas de las ciencias naturales, incluida hasta hace poco la física experimental. Los vestigios del más antiguo sentido de "física" como nombre genérico de las ciencias naturales todavía a principios del siglo XIX, y la ambigüedad del adjetivo inglés *physical*, contribuyeron a la confusión de la filosofía de la física con la filosofía de la ciencia. No fue hasta principios de los años setenta del siglo XX cuando los biólogos reaccionaron al estrecho enfoque y establecieron grupos propios conjuntamente con filósofos interesados en la biología. Pasaron todavía dos décadas más para que se produjera un movimiento parecido con respecto a la química. En cierto sentido, la filosofía de la ciencia repite hoy tardíamente el proceso decimonónico de ramificación y profesionalización de las ciencias naturales.

La filosofía de la química antes de los años noventa [6]

Aunque la principal corriente occidental de la filosofía de la ciencia ha descuidado la química, no es cierto que no hubiera filosofía de la química antes de los años noventa. Veremos más adelante (segunda parte del capítulo, "Tendencias y temas recientes de la filosofía de la química") que la corriente imperante de la historiografía de la filosofía simplemente ignoró lo que los filósofos clásicos habían dicho de la química. En segundo lugar, otros estudiosos, en particular químicos e historiadores de la química, llenaron el vacío dejado por los filósofos profesionales. En tercer lugar, la filosofía de la ciencia en los países comunistas fue lo bastante amplia para incluir la química, sobre todo en el periodo transcurrido de fines de los años cincuenta a 1990.[7]

Filosofía dialéctica de la química

La filosofía de la química en los países comunistas se inspiró en el materialismo dialéctico de Engels, donde la química cumplía una función prominente como argumento contra lo que él llamaba el materialismo vulgar o francés, es decir, la filosofía mecánica. Al igual que Comte pocas décadas antes, pero en relación con la distinción de Hegel entre "mecanismo", "quimismo" y "organismo", Engels propuso una jerarquía no reductiva de las ciencias. Para el nivel mecánico, el químico y el fisiológico postuló distintas "formas de movimiento", cada una con leyes propias, además de "leyes dialécticas" generales para la transformación desde los niveles inferiores a los superiores.

Aunque el propio tratamiento de la química de Engels permaneció fragmentario, filósofos del siglo XX desarrollaron sus ideas. No tardaron en comprender que los fenómenos químicos podían servir para ilustrar leyes universales de la doctrina de Engels. Por ejemplo, las reacciones ácido-básicas se usaron para ejemplificar su "ley de las contradicciones" en torno a las fuerzas opuestas de la naturaleza. Además, las reacciones ácido-básicas, cuando se llevaban a cabo por volumetría con indicadores, permitían visualizar a todo color su ley general "del paso de lo cuantitativo a lo cualitativo". Los filósofos de la ciencia en los países comunistas tenían una función establecida en la educación superior científica y estaban oficialmente obligados a interpretar hechos, problemas y avances científicos concretos dentro del marco general del materialismo dialéctico e histórico. Como Engels había reservado una "forma de movimiento" propia para la química, los filósofos tenían libertad para tratar la química como campo autónomo. De hecho, produjeron un rico acervo de estudios sobre fenómenos, leyes, teorías, dinámica de teorías y formación de subdisciplinas de la química moderna. Es imposible revisar la literatura en la materia, ya que hay estudios sobre casi todos los temas filosóficos, aunque de distinta calidad. Podría decirse al menos que el marco decimonónico de Engels fue lo bastante liberal para ampliar en detalle temas complicados como la relación entre la química y la mecánica cuántica, pero demasiado ingenuo desde el punto de vista epistemológico para abordar conceptos de química cuántica como las estructuras de resonancia de Pauling.[8]

La argumentación de la filosofía dialéctica de la química demuestra que la filosofía poskantiana de la ciencia no habría hecho caso omiso de la química de haber confiado en autoridades posteriores. Engels publicó su trabajo en la década de los setenta del siglo XIX, cuando la formación de las disciplinas científicas modernas estaba casi completa, sin que la mecánica fuese más que una subdisciplina de la física moderna. Kant había publicado hacía un siglo, antes de la formación de las disciplinas modernas, en la actitud premoderna de establecer la mecánica racional como única ciencia real y desacreditar las entonces nacientes ciencias experimentales. Aunque a ambos se les ha erigido en autoridades históricas de validez eterna en distintas ideologías filosóficas, hoy en día sus opiniones sobre la ciencia revisten sólo interés histórico, y la opinión de Kant resulta sin duda mucho más anacrónica que la de Engels. Sin embargo, el legado kantiano aún predomina en la filosofía de la ciencia. Por ejemplo, cuando la parte oriental de Alemania se unió con la occidental en 1990, la filosofía dialéctica de la química desapareció de inmediato, en beneficio del kantismo falto de inspiración que ha permeado la parte occidental. Por ende, el descuido de la química es también consecuencia de la elección arbitraria de autoridades anacrónicas. En la segunda parte del capítulo argumentaré a favor de un entendimiento de la filosofía que se deshaga tanto de anacronismos como de autoridades.

Filosofía de la química sin filósofos

Mientras los filósofos profesionales de los países de Occidente desatendían la química, estudiosos de diversas disciplinas abordaron el tema, cada uno desde una perspectiva propia y con preguntas específicas. Los estudiosos de la enseñanza de la química, en particular, siempre han reconocido la necesidad de reflexionar en los métodos y trabajar en la aclaración de conceptos, de modo que la mayoría de sus publicaciones periódicas siguen siendo una fuente abundante de estudio para los filósofos. Los químicos prácticos solían tropezar con problemas filosóficos cuando sus investigaciones los desafiaban a reflexionar sobre nociones o ideas metodológicas generalmente aceptadas. Entre los ejemplos destacados de los primeros tiempos se cuentan Benjamin Brodie, Frantisek Wald, Wilhelm Ostwald y Pierre Duhem. Sin embargo, la serie de químicos con inquietudes filosóficas no terminó a principios del siglo XX.[9] Por ejemplo, la obra de Paneth (1962) sobre los isótopos lo hizo pensar en el concepto de elementos químicos. La reflexión de Mittasch (1948) acerca de la noción de causalidad en química se derivó de sus estudios de la catálisis química. Ante la renuencia de sus contemporáneos científicos a aceptar sus teorías, y con base en su concienzuda experiencia en la práctica de laboratorio, Polanyi (1958) cuestionó las metodologías científicas racionalistas aceptadas señalando la importancia de los factores sociales y del papel del conocimiento tácito. Caldin (1959, 1961), quien como cualquier químico trabajó sobre todo en el laboratorio, alegó que la metodología popperiana entonces imperante era incapaz de comprender la función de la experimentación en las ciencias experimentales y el modo en que los científicos se ocupan de las teorías.

Desde fines de los años setenta, por otra parte, químicos teóricos que trabajaban en el desarrollo de *modelos* de la química cuántica para fines químicos empezaron a poner en duda la ingenua opinión reduccionista, que no obstante era común entre los filósofos de la ciencia occidentales, según la cual los conceptos y leyes químicos podían inferirse simplemente de principios mecanocuánticos.[10] En un fecundo ensayo, Woolley (1978) afirmó que el concepto de estructura química no podía deducirse de la mecánica cuántica. Primas (1981, 1985) dedicó todo un libro al tema del reduccionismo, sosteniendo que el holismo mecanocuántico no permite inferir aseveraciones sobre objetos químicos sin presupuestos adicionales. Del Re y Liegener consideraban que los fenómenos químicos se dan en un nivel de complejidad superior que se deriva del nivel mecanocuántico, mas no se reduce a él (Del Re, 1987; Liegener y Del Re, 1987a, 1987b). También otros químicos empezaron a cuestionar el reduccionismo ingenuo (Theobald, 1976; Lévy, 1979; Bunge, 1982; Weininger, 1984).

Como nunca se ha trazado una frontera nítida entre la filosofía y la historia de la ciencia, no es de extrañar que muchos historiadores de la química hayan abordado el campo ocupándose de consideraciones filosóficas del pasado, dos de las cuales llegaron a distinguirse tanto entre los temas históricos de la química que es imposible reseñar aquí la literatura. Se trata de la consideración metafísica del atomismo y la consideración metodológica del cambio conceptual y el progreso teórico según los ejemplifica la exposición de Thomas Kuhn de la “revolución química”.[11] Desde luego, ambos temas atrajeron también a muchos filósofos. El segundo tema, en particular, produjo durante un tiempo un alto grado de colaboración y competencia fructíferas, y un aluvión de estudios casuísticos. Cuestionados por el rigor historiográfico de sus colegas, los estudios de los filósofos a menudo no diferían gran cosa de las obras históricas, salvo en la mayor ambición de convertirlos en argumento a favor o en contra de una postura metodológica general, por ejemplo, la de Popper, Kuhn, Lakatos, etc. Sin embargo, elegir historias de la química como pruebas de una u otra metodología general de la ciencia en conjunto difícilmente es un argumento concluyente, y no puede contar como filosofía de la ciencia propiamente dicha. Esto nunca ha recibido mejor crítica que la de la química y filósofa Ströker (1982), en uno de los relatos históricos más detallados de la “revolución química”.

Más que en otras ramas de la historia, los historiadores de la química trataron cuestiones filosóficas en un abundante acervo de excelentes estudios sobre la historia de las ideas, las teorías y los métodos, y de las mutuas repercusiones entre la química, por un lado, y las disciplinas contiguas, la filosofía, las humanidades, la religión y la sociedad en general, por el otro.[12] En la medida en que lo hicieron a fin de lograr un mejor entendimiento de nuestra actual cultura intelectual y del papel que en ella desempeña la química, desarrollaron un trabajo que los filósofos profesionales se negaron a hacer. Es interesante que los pocos filósofos occidentales que se ocuparon de la química por extenso en libros, por ejemplo, Bachelard (1932, 1953), Ströker (1963, 1982) y Dagognet (1969), tuvieran marcados intereses en la historia. Volveré a este punto, que de ninguna manera es mero azar (véase la sección “Análisis de la estructura de la química”).

El ejemplo de la historia anterior a 1990 en los países occidentales ilustra que se necesitan reflexiones filosóficas sobre la química, les interese o no les interese a los filósofos profesionales. Esta necesidad comprende tanto el análisis de hechos y aspectos específicos de la química como perspectivas integradoras para situarla en el conjunto de la cultura y la historia de las ideas. Gracias a su formación, los filósofos suelen tener aptitudes particulares para satisfacer estas necesidades si se acompañan de cierto conocimiento de la química e interés en ella. Uno y otro faltaban, sin embargo, salvo en unas cuantas personas ajenas a los círculos establecidos.

Establecimiento social

La distinción más evidente de la emergencia de la filosofía de la química en los años noventa con respecto al periodo precedente fue su establecimiento social. Mientras que los estudiosos anteriores trabajaron en relativo aislamiento, la nueva generación buscó contactos e intercambios de ideas entre sí. Desde fines de los años ochenta, químicos, filósofos e historiadores de la química empezaron a reunirse en grupos de trabajo más o menos formales, con encuentros periódicos en muchos países, como el Werkgroep Filosofie van de Chemie en Holanda, el Gruppo Nazionale di Storia e Fondamenti della Chimica en Italia y el Arbeitskreis Philosophie und Chemie en Alemania. Además, las industrias químicas hicieron un llamado para tender puentes entre la química y las humanidades a fin de mejorar la mala imagen pública de esta ciencia.[13] En 1994 los encuentros nacionales se convirtieron en una serie de conferencias internacionales en Londres (marzo), Karlsruhe (abril), Marburgo (noviembre) y Roma (diciembre). En 1997 los vínculos internacionales posibilitaron el establecimiento formal de la Sociedad Internacional para la Filosofía de la Química, que sostiene simposios anuales en verano. Se iniciaron dos publicaciones periódicas: *Hyle: International Journal for Philosophy of Chemistry* (desde 1995, dirigida por el autor) y *Foundations of Chemistry* (desde 1999, dirigida por Eric Scerri). El surgimiento paralelo de las tecnologías de Internet, que pronto se utilizaron para muchos fines (publicaciones electrónicas, foros de discusión por correo electrónico, bibliografías de actualización periódica, tableros de información de conferencias, planes de estudios, etc.), fue una ayuda esencial para establecer una comunidad y atraer a un público más amplio.

El mencionado descuido histórico de la química es también, en parte, producto de historiadores de la filosofía que simplemente ignoraron lo que los filósofos clásicos habían dicho de la química. Esto se ha sacado a la luz en un número cada vez mayor de estudios recientes. Un ejemplo destacado es la *Opus postumum* de Kant, que no se publicó hasta principios del siglo XX (y una traducción inglesa muy tardía, en 1993), a pesar de que contenía una revisión completa de su anterior filosofía teórica contra los principios de la moderna química de Lavoisier.[14] Además, los extensos textos de Hegel sobre química, aunque incluidos en sus libros más famosos, no se sometieron a investigaciones académicas hasta hace poco.[15] Aunque hace mucho que el libro de Duhem *La théorie physique. Son objet—sa structure* (1905-1906) se volvió un clásico de la filosofía de la ciencia y se tradujo a muchos idiomas, otra obra suya, *Le mixte et la combinaison chimique* (1902) no se tradujo al inglés hasta 2002. ¿Quién habría dicho que incluso Rousseau escribió un libro sobre química (Bensaude-Vincent y Bernardi, 1999)? Corresponde a los historiadores de la filosofía explorar más textos sobre química en filósofos clásicos como Leibniz, Schelling, Shopenhauer, Herschel, Comte, Peirce, Broad, Alexander, Mill, Cassirer y Bachelard, por mencionar sólo algunos que acuden de inmediato a la mente.

La lucha con el reduccionismo

Un tema todavía importante de la actual filosofía de la química es la reducción, no de la biología a la química, sino de la química a la física. La crítica del reduccionismo cumple distintas funciones. Primero, ofrece un entendimiento más preciso y técnico de las limitaciones de los enfoques mecanocuánticos de la química y, por lo mismo, define áreas independientes para la filosofía de la química. Por ejemplo, en una serie de ensayos, Scerri (1991, 1994) alega de manera convincente que los enfoques mecanocuánticos no son capaces de calcular las configuraciones electrónicas precisas de los átomos. Dado que lo anterior se ha tomado, desde la primitiva teoría atómica de Bohr, como la explicación y reducción mecanocuánticas del sistema periódico de los elementos químicos, este último está abierto a nuevos análisis filosóficos (véase la sección "Análisis de la estructura de la química"). Pueden encontrarse argumentos similares en relación con el concepto de estructura molecular, que dan seguimiento a las cuestiones planteadas por Woolley (véase la sección "Filosofía de la química sin filósofos"). En segundo lugar, la crítica del reduccionismo en el nivel "más bajo" de la química a la mecánica cuántica pone en duda el microrreduccionismo como postura metafísica, epistemológica o metodológica general y contribuye así a la filosofía general. En el más detallado estudio filosófico de varias formas de reduccionismo (incluidos la superveniencia y el esencialismo microestructural a la manera de Putnam y Kripke), Van Brakel (2000) hace de la química un argumento a favor de una especie de pragmatismo en el que la "imagen manifiesta" del sentido común y las ciencias empíricas prima sobre la "imagen científica" de la microfísica. En Psarros (1999), el rechazo del reduccionismo es incluso un presupuesto necesario para su extenso trabajo sobre el fundamento culturalista de conceptos, leyes y teorías químicas, los cuales busca en prácticas, normas y valores culturales precientíficos. Para muchos otros, entre quienes me incluyo, ese rechazo respalda una postura pragmática y pluralista sobre métodos que distinguen claramente entre campos de investigación donde los enfoques mecánico-cuánticos son inadecuados o incluso inútiles en comparación con otros enfoques, y campos donde son eficaces y aun indispensables. En tercer lugar, perdida la confianza en el reduccionismo para garantizar la unidad de las ciencias, las nuevas relaciones entre las ciencias autónomas, como las semejanzas estructurales y la interdisciplinariedad, han quedado sujetas a investigación tanto filosófica como histórica.[16]

Adaptación de conceptos filosóficos

Los conceptos de la corriente dominante de la filosofía de la ciencia, a causa de su estrecho enfoque de la física teórica, suelen requerir una revisión considerable para que arrojen alguna luz sobre la química. La brecha entre lo que Kuhn (1976) ha llamado las "ciencias matemáticas" y las "baconianas" es lo que los filósofos de la química deben sortear, porque la química moderna comprende ambas. Como la química es por mucho la disciplina científica con mayores repercusiones en todas las demás ciencias experimentales, los filósofos de la ciencia también hacen contribuciones valiosas a nuestro entendimiento filosófico de las ciencias cuando adaptan conceptos clásicos para comprender la química. Los ejemplos, dispersos en las dos publicaciones periódicas citadas y en numerosas antologías y colecciones generales,[17] incluyen los conceptos de experimento, ley, modelo, predicción, explicación, clases naturales, sustancia y proceso; los enfoques científicos de la construcción de conceptos y modelos, y la clasificación; el tratamiento de teorías contradictorias; métodos de investigación en el sentido de explorar lo nuevo; la función de los instrumentos en la investigación; la distinción y relación entre ciencia y tecnología, etc. Además, el tema del realismo científico, a veces mal usado para distinguir la física teórica de las otras ciencias, que por lo mismo se descalifican llamándolas "ciencias inmaduras", aparece bajo una nueva luz si se aplica a la química, y aun se vuelve un concepto metodológico de investigación si se aplica a la química sintética (Schummer, 1996a). Aunque los filósofos de la física matemática han confinado la metodología al "contexto de justificación", si no a teoría confirmatoria, los filósofos de ciencias experimentales como la química ponen el acento en el "contexto de descubrimiento", es decir, en la metodología de la investigación científica.

Como cada disciplina científica tiene conceptos, métodos y teorías fundamentales propios, la filosofía de la química alcanza un estado de madurez, en mi opinión (véase la última parte de este capítulo), cuando se centra en peculiaridades de la química. Esto exige no sólo una doble competencia en química y filosofía, sino un entendimiento profundo de la historia de la química, porque nuestras disciplinas científicas actuales, con todas sus peculiaridades, son entidades históricas, fotografías instantáneas en un proceso de desarrollo. Así, a diferencia de los filósofos generales de la ciencia, con sus ideas eternas, aunque a veces personales, de la "ciencia general", muchos filósofos de la química convergen con los historiadores de la química en el análisis de conceptos, métodos y teorías fundamentales de la química moderna. Es en estas áreas donde se han hecho muchos estudios durante la última década, de manera que puedo dar sólo una breve lista de los temas más importantes.

En cuanto a conceptos fundamentales, los análisis filosóficos e históricos comprenden conceptos químicos como elemento, sustancia pura, especie química, compuesto, afinidad, reacción química, átomo, estructura molecular y aromaticidad.[18] El reciente interés en los métodos químicos se ha centrado no sólo en métodos prácticos como la experimentación e instrumentación y la quimiosíntesis,[19] sino en métodos cognitivos como el lenguaje gráfico de la química y las varias formas de construcción de modelos y representación.[20] Siguen descuidados los métodos de clasificación —probablemente un legado del enfoque tradicional en la física moderna "exenta de clasificaciones" antes del surgimiento de la era de las partículas—, aunque recientes estudios del sistema periódico combinan aspectos clasificatorios y teóricos.[21] Por lo que respecta a las teorías químicas, las estructuras matemáticas axiomáticas de la física, con su validez aparentemente universal, han hecho que los filósofos se resistan a aceptar lo que los químicos llaman, casi sin distinción alguna de significado, teorías, modelos o leyes. Así, salvo los mencionados estudios sobre los modelos en química, la mayoría de los trabajos actuales sobre teorías químicas tienen una fuerte orientación histórica o son sobre química cuántica y química física.[22]

Irónicamente, los filósofos de la química emergieron en una época en que las actividades científicas trascendían cada vez más las fronteras disciplinares hacia una investigación orientada a los problemas. Desde la ciencia ambiental hasta la nanotecnología (Schummer, 2004c), los químicos se dedican intensamente a estas actividades, de manera que retan a los filósofos de la química a que los tomen en serio. Tres libros recientes, cada uno combinando a su modo análisis filosóficos e históricos de la investigación interdisciplinaria, han aceptado este reto. Rheinberger (1997) analizó los entornos experimentales, las condiciones epistemológicas y la cultura interdisciplinaria donde la investigación del cáncer de los años cincuenta avanzaba hacia la síntesis de proteínas como base bioquímica de la biología molecular. Aplicando ideas de la antigua filosofía de la naturaleza y la tecnología, Bensaude-Vincent (1998) investigó la moderna ciencia de materiales, que se ha desplazado de los materiales puros a los compuestos diseñados especialmente para diversos fines tecnológicos. Con una opinión crítica de los enfoques clásicos de la filosofía de la ciencia, Christie (2001) examinó la base metodológica sobre la cual las ciencias atmosféricas aceptaron, desde los años setenta, las teorías del agotamiento de la capa de ozono.

Además de las fronteras disciplinares de las ciencias, hay fronteras disciplinares dentro de la filosofía que los filósofos de la química están a punto de trascender. Si por "filosofía de la ciencia" se entiende reflexión filosófica sobre la ciencia, no hay necesidad de restringir ésta al razonamiento epistemológico, metodológico y metafísico, como han hecho los filósofos de la física. La filosofía es un campo mucho más rico, y ciencias como la química tienen muchos más aspectos interesantes, a veces incluso más apremiantes, que los filósofos pueden tratar. Así, los trabajos recientes y en preparación incluyen números especiales sobre ética de la química *(Ethics of Chemistry*, por *Hyle*), química verde *(Green Chemistry*, por *Foundations of Chemistry*), y estética y visualización en química *(Aesthetics and Visualization in Chemistry*, por *Hyle*). Una vez que se reconoce toda la esfera de acción de la filosofía, los temas de la filosofía de la química germinan en abundancia (véase la sección "Descubrir temas de filosofía de la química: algunos ejemplos"). Esto podría ir en detrimento de paradigmas simples del campo, pero la ganancia intelectual es incomparablemente mayor.

DE LA INFANCIA HACIA LA MADUREZ: UN PUNTO DE VISTA PRAGMÁTICO

Así como todo relato histórico ordena la información de acuerdo con ciertas preferencias y valores, así también mi revisión del desarrollo reciente de la filosofía de la química en la última parte del capítulo es personal. Se basa en determinadas ideas de lo que la filosofía puede y debería hacer, en mi opinión, para satisfacer necesidades generales de la sociedad y para evitar las deficiencias de estancamiento y anquilosamiento de las que tenemos abundantes pruebas en otros campos de la filosofía. En esta parte, que trata la pregunta normativa "¿a dónde deberíamos ir?", voy a argumentar a favor de estas ideas distinguiendo entre temas de la infancia y temas de la madurez desde un punto de vista pragmático.

Para evitar malentendidos, insisto en que los temas de la infancia son muy importantes y no deberían descuidarse. Son importantes, sin embargo, sólo durante el estado de autodefinición y estructuración de un campo, y para preparar los temas de la madurez. Creo que la filosofía de la química aún se encuentra, en gran medida, en ese estado.

Redescubrir a los filósofos clásicos de cierto campo es un tema característico de la infancia o la crisis (en el sentido original griego de separación). Pertenece al tema general de escritura de una historia disciplinar. Lejos de no venir de ningún sitio, se demuestra que el nuevo campo está arraigado en una antigua tradición, de la cual recibe autoridad e importancia. Los ejemplos clásicos son la historia de la electricidad de Priestley, de 1767, y la historia de la electroquímica de Ostwald, de 1896. De igual manera, las quejas y los análisis del anterior descuido de un campo son temas de la infancia, como todo lo que hago en el presente capítulo. Por otra parte, redescubrir a los clásicos puede ser una empresa inspiradora en cuanto nos muestra perspectivas olvidadas a las cuales dar seguimiento en la futura investigación filosófica.

En segundo lugar, luchar con el reduccionismo es en la mayoría de los casos, mas no siempre, un tema de la infancia en relación con la química, pero de la madurez tratándose de la filosofía de la física. Una vez más, insisto, es importante para la filosofía de la química. Sienta las bases de estudios más serenos y profundos de temas cuya independencia lógica se ha demostrado y tiende, por tanto, hacia temas de la madurez. Además, sitúa la filosofía de la química en el contexto de la filosofía general y contribuye así a su aceptación más amplia. Nos ayuda a desarrollar una mejor comprensión de las relaciones mucho más complejas entre las ciencias, tanto históricas como lógicas.

En tercer lugar, adaptar conceptos filosóficos clásicos a un análisis de la química es también un tema preliminar, mientras que el análisis en sí no lo es. Para los filósofos, los conceptos son herramientas como los espectrómetros lo son para los químicos. Si emplean herramientas inadecuadas, los resultados son, a lo sumo, irrelevantes. Por ejemplo, desde el punto de vista de la filosofía aceptada de la ciencia, un experimento es un medio para probar, mejorar o desarrollar una teoría. Podemos encontrar esta noción también en la química, y hallamos incluso ejemplos de todas las funciones que los filósofos han asignado alguna vez a los experimentos. Sin embargo, si examinamos lo que los químicos entienden por “experimento”, resulta que la gran mayoría utiliza el término en un sentido del que los filósofos difícilmente están al corriente (Schummer 2004a).

Una definición pragmática de los temas de la madurez

Los temas que he mencionado hasta ahora se refieren a la infancia sólo en relación con lo que considero temas de la madurez. Sostengo que un campo filosófico alcanza un estado de madurez sólo si define aspectos propios con respecto a las peculiaridades de su objeto. En nuestro caso eso significa que los temas de la madurez son aquellos que se derivan de las peculiaridades de la química. Esto no es en absoluto una perogrullada en filosofía. De hecho, muchos filósofos rechazan esta idea y sostienen, al contrario, que las consideraciones filosóficas tienen anterioridad o independencia de cualesquiera objetos particulares, y que los temas filosóficos verdaderos no son otra cosa que presuntos problemas perennes o generales. Para ellos, la química sería interesante sólo si les diera ejemplos o explicaciones de los problemas generales de la filosofía, y en la medida en que así lo hiciera. Si la opinión de perennidad fuera correcta, no habría jamás una filosofía particular de la química, ni de la biología, etc., porque el interés filosófico en tales campos sería sólo instrumental, a fin de resolver cuestiones perennes. Como he indicado con mis comentarios históricos de la filosofía en la primera parte de este capítulo, hay buenas razones para dudar de tales problemas perennes de la filosofía, que más bien son consecuencia de una historiografía arbitraria de la filosofía en función de autoridades preferidas. En lugar de eso, yo defendería una especie de pragmatismo según el cual las consideraciones filosóficas deberían derivarse siempre de los objetos específicos (los *prágmata* en griego).

A diferencia de la opinión de perennidad, la opinión pragmática requiere una comprensión detallada de la química, no sólo en su estado presente, sino en su desarrollo histórico. Por eso la filosofía de la química debe estar estrechamente ligada a la historia de la química. Además, debido al increíble tamaño de la química contemporánea (alrededor de un millón de publicaciones al año), se necesitan métodos nuevos para comprender lo que los químicos hacen en realidad. No ayuda mucho preguntar a uno o dos químicos qué hacen sus cuatro millones de colegas. Eso simplemente está fuera del alcance intelectual de las personas (Schummer, 1999). Más bien se necesitan métodos empíricos para emitir juicios válidos. Por ejemplo, la mayoría de la gente no creería que mucho más de la mitad de los químicos sintetizan sustancias nuevas de manera sistemática; sin embargo, eso es lo que dice el análisis estadístico (Schummer, 1997b). Por último, y no menos importante, las consideraciones filosóficas de la química deberían guardar relación con los problemas que los químicos afrontan realmente.

Una vez que entendemos mejor lo que hacen y lo que les preocupa, podemos hacer los análisis filosóficos que considero temas de la madurez. Éstos incluyen las investigaciones conceptuales, metafísicas y metodológicas antes mencionadas. Sin embargo, también comprenden temas que están fuera del alcance de la filosofía convencional de la ciencia.

Una mirada a la filosofía de la biología

Es instructivo ver lo que los filósofos de la biología consideran hoy los principales temas de su disciplina, en un estado de madurez como podemos suponer. Tómese, por ejemplo, el índice de la reciente antología *The Philosophy of Biology*, coordinada por David L. Hull y Michael Ruse, y publicada por la Oxford University Press en 1998 (véase el cuadro II.1). Se trata de una colección de 36 artículos dividida en 10 secciones temáticas. Las cuatro primeras secciones son sobre asuntos metafísicos, metodológicos y conceptuales de la teoría evolutiva; la sección v está dedicada a cuestiones ontológicas de la taxonomía. La segunda mitad del libro asocia diversos temas de la biología con distintas ramas de la filosofía de la ciencia, como la antropología, la ética teórica, la ética aplicada, la filosofía de la historia y la filosofía de la religión. No hay un esquema general de cómo se relacionan los temas científicos con asuntos filosóficos, de modo que pudiéramos trasladarlos simplemente a los asuntos filosóficos de la química. En vez de eso, los asuntos filosóficos se derivan de las peculiaridades de los temas biológicos.

CUADRO II.1. *Índice de* The Philosophy of Biology, *coordinado por David L. Hull y Michael Ruse, Oxford University Press, Oxford, 1998; 36 artículos agrupados en 10 secciones temáticas*

Encabezados de sección	*Ramas filosóficas relacionadas*
I. Adaptación	
II. Desarrollo	Cuestiones metafísicas, metodológicas y conceptual de la teoría evolutiva
III. Unidades de selección	
IV. Función	
V. Especie	Ontología, clasificación
VI. Naturaleza humana	Antropología
VII. Altruismo	Ética teórica
VIII. Proyecto del genoma humano	Ética aplicada
IX. Progreso	Filosofía de la historia, epistemología
X. Creacionismo	Filosofía de la religión

Lo que los filósofos de la química pueden aprender, y en mi opinión deberían aprender, de la filosofía de la biología es a descubrir cuestiones filosóficas derivadas de las peculiaridades de la química. No hay reglas sencillas ni recetas para hacerlo, ya que la filosofía es una empresa creativa. Sin embargo, se pueden tomar las ramas de la filosofía como guía, como instrumentos analíticos antes que como conjuntos de temas perennes. Para ilustrar esto, ofrezco por último algunos ejemplos de mi obra reciente, organizados de acuerdo con distintas ramas de la filosofía y cada uno relacionado, en mi opinión, con peculiaridades evidentes de la química.[23]

1) Lógica. La lógica filosófica, anterior a la lógica formal o simbólica, explora estructuras conceptuales con las que representamos y reflejamos el mundo. Si estudiamos la estructura conceptual de la química, resulta que está construida sobre una clase peculiar de relaciones (Schummer, 1997c, 1998a). Por ejemplo, una propiedad química describe una compleja relación dinámica entre varias sustancias que depende del contexto, y no algo que es propio de una cosa aislada. Algunos filósofos clásicos, como Hegel, Cassirer y Bachelard, reconocieron hace tiempo la peculiar estructura relacional de la química, que también está profundamente arraigada en nuestro sentido común, por ejemplo, cuando usamos metáforas de la química para describir relaciones sociales. Sin embargo, con excepción del filósofo químico Peirce y sus seguidores, los lógicos han descuidado gravemente las relaciones, tanto que apenas comprendemos la manera en que las complejas estructuras conceptuales de la química se construyen a partir de relaciones químicas básicas (Schummer, 1996c, 1998a).

2) Ontología. Cuando usamos estructuras conceptuales para expresar el mundo, entramos en el terreno de la ontología. La química ha construido el sistema de clasificación más avanzado de todas las ciencias para sus más de 20 millones de sustancias, del que no existe modelo alguno en otros campos. Tomar en serio la química como ciencia clasificatoria, desde el punto de vista ontológico, requiere la investigación de nociones muy abstractas, como entidad química, especie, identidad, semejanza, pertenencia a clases, distinciones y jerarquías. También en este caso, estamos apenas al principio de un entendimiento que demuestra que la estructura ontológica de la química sigue en estado de cambio (Schummer, 2002a). Por ejemplo, aunque la clasificación química clásica se basaba en una estricta correspondencia entre sustancias y moléculas puras, recientes tendencias a incluir también especies cuasimoleculares ponen en duda el sistema tradicional y suscitan profundas cuestiones ontológicas sobre los criterios de identidad de las especies.

3) Metodología. Aunque los filósofos de la ciencia nos han venido diciendo que los científicos aspiran a una descripción teórica verdadera del mundo natural, la gran mayoría de los químicos (lo que también significa la gran mayoría de los científicos; véase la gráfica II.1) se han dedicado en realidad a sintetizar sustancias nuevas, es decir, a cambiar el mundo natural. No cabe duda de que la quimiosíntesis es la peculiaridad más

evidente de la química, pero también la más descuidada porque es ajena a cualquiera de las ideas aceptadas de la filosofía de la ciencia. Puesto que la metodología se ocupa de los métodos científicos, una comprensión metodológica de la química sintética requiere un análisis de las metas, procedimientos, técnicas y dinámica de ese quehacer (Schummer, 1997a, 1997b). Necesitamos, en particular, un mejor entendimiento de los conceptos teóricos de la química, que, a diferencia de los conceptos mecanocuánticos, no sólo predigan fenómenos naturales, sino que sirvan de guía para producir sustancias nuevas un millón de veces al año.

4) Filosofía del lenguaje y semiótica. Los químicos tienen un lenguaje propio de signos de fórmulas estructurales y mecanismos de reacción, que exige un análisis semiótico (Schummer, 1996c). Lejos de ser un simple conjunto de signos icónicos, simbólicos o denotativos de índices (según la semiótica clásica de Peirce y Morris), es un sistema lingüístico particular dotado de elementos de teoricidad que permite a los químicos comunicarse entre sí de manera concisa y precisa en torno a entidades y relaciones químicas; es también el principal dispositivo teórico para predecir y producir nuevas sustancias químicas (Schummer, 1998a). En comparación con su extraordinaria eficacia, es todavía muy poca nuestra comprensión filosófica de la manera en que se codifica la teoría en el lenguaje, y de si el sistema es un nuevo tipo de teoría, diferente de lo que conocemos de otras ciencias.

5) Filosofía de la tecnología. Aunque la química sintética se distingue por su productividad, esto no implica que sea una especie de tecnología. De hecho, es un buen ejemplo para evaluar varias distinciones convencionales entre ciencia y tecnología según sus ideas subyacentes de ciencia (Schummer, 1997d). Resulta que todas estas ideas difícilmente concuerdan con la ciencia experimental contemporánea. El caso de la química sintética podría ayudar a afinar los conceptos de ciencia y tecnología para aumentar la comprensión de sus relaciones. Por ejemplo, los historiadores de la tecnología hoy consideran que la industria química es la única industria de base efectivamente científica. Si esto es cierto, los filósofos afrontan el reto de explicar la peculiar relación epistemológica entre el conocimiento químico y la tecnología sin confundirlos.

6) Filosofía de la naturaleza. Mientras que en todas las demás ciencias naturales la naturaleza es, por definición, el objeto de su estudio, la química rompe la regla en virtud de la extraña oposición entre “lo natural y lo químico”, sostenida lo mismo por químicos que por no químicos. En este caso, compete a los filósofos analizar en qué noción peculiar de naturaleza radica la oposición, y si ésta tiene o no tiene fundamento. Los análisis históricos revelan que la oposición es posterior a la antigua filosofía griega y ha permeado la era cristiana desde los primeros tiempos hasta el presente (Schummer, 2001a, 2003b, 2004b). Los análisis sistemáticos muestran que la oposición, aun siendo insignificante desde el punto de vista descriptivo, cumple fines normativos en juicios cuasimorales implícitos (Schummer, 2003b). He aquí también una tarea para los filósofos: sentar las bases de un discurso normativo haciendo explícito lo implícito.

7) Filosofía de la literatura. Otro campo importante para hacer explícito lo implícito

es la literatura, en la medida en que uno y otro son vehículos de la imagen pública de los científicos. Hay muchas quejas de la brecha entre las "dos culturas" y de la mala imagen de los científicos, expresada en personajes como el "científico loco". También es bien sabido que los científicos con frecuencia aparecen en los medios de comunicación como una mezcla del alquimista medieval y el químico moderno. Sin embargo, poco se sabe de por qué los escritores dieron forma a estos personajes. Investigaciones de la literatura del siglo XIX revelan que los escritores escogieron de entre todas las ciencias la química como blanco de ridículo por consideraciones metafísicas, teológicas y morales (Schummer, en preparación). Una vez más, compete a los filósofos de la química analizar esas acusaciones de particularismo, materialismo, ateísmo y soberbia, que conforman históricamente el trasfondo filosófico de la imagen pública de la ciencia actual.

8) Ética. Aunque la ética aplicada es hoy un floreciente campo de la filosofía, la química no recibe casi atención. Esto es más que asombroso porque muchas cuestiones morales importantes, desde consideraciones ambientales y farmacológicas hasta la investigación de armas químicas, tienen una estrecha relación con la química. El hecho de que los especialistas en química sintética no sólo produzcan conocimiento, sino que cambien el mundo material, ha suscitado preocupaciones públicas desde hace por lo menos dos siglos. Se necesitan análisis éticos sobrios que separen las cuestiones morales propiamente dichas de las preocupaciones cuasimorales transmitidas por la literatura o por las nociones normativas de la naturaleza, a fin de preparar un marco ético para un discurso moral (Schummer, 2001b, 2001-2002, y en preparación).

9) Estética. Más que cualesquiera otros científicos, los químicos hacen uso intensivo de toda clase de medios de visualización, desde simples dibujos hasta la realidad virtual. Además, han sostenido cada vez más que sus productos sintéticos son bellos, y hay evidentes pruebas empíricas de que esto constituye una motivación real de la investigación. Por estas dos razones es necesario estudiar la función de la estética en la investigación química (Schummer, 1995, 2003a; Spector y Schummer, 2003). El análisis estético, en particular, puede ayudar a entender aspectos decisivos de creatividad e innovación en la investigación. Si la belleza es un valor aceptado en la investigación, tenemos que comprender en qué teoría estética se basa esa noción de belleza y cómo se relacionan los valores estéticos con otros valores, tanto epistemológicos como morales, de la investigación.

La lista de temas podría extenderse fácilmente. Sin embargo, no quiero dirigir la atención hacia mi propia investigación. Si el capítulo tiene un mensaje, éste consiste en animar a los filósofos de la química a pensar de forma independiente, ser escépticos ante los problemas perennes y descubrir nuevos temas filosóficos de la química. Quedan muchos por hallar.

Permítaseme por último volver a la gráfica II.1. Si se compara el tamaño de la filosofía con el de la química, es evidente que la filosofía de la química jamás será siquiera visible en esa cifra. Sin embargo, la sola masa de la química y su omnipresencia hacen de la

filosofía de la química uno de los más importantes y difíciles campos de la filosofía.

BIBLIOGRAFÍA

Bachelard, G., *Le pluralisme cohérent de la chimie moderne*, J. Vrin, París, 1932.

———, *Le matérialisme rationnel*, Presses Universitaires de France, París, 1953.

Baird, D., "Analytical Chemistry and the Big Scientific Instrumentation", *Annals of Science*, núm. 50, 1993, pp. 267-290.

———, *Thing Knowledge: A Philosophy of Scientific Instruments*, University of California Press, Berkeley/Los Ángeles, 2004.

Bensaude-Vincent, B., *Éloge du mixte. Matériaux nouveaux et philosophie ancienne*, Hachette, París, 1998.

———, y B. Bernardi (eds.), *Jean-Jacques Rousseau et la chimie*, número especial de *Corpus*, núm. 36, 1999.

Bhushan, N., y S. Rosenfeld (eds.), *Of Minds and Molecules. New Philosophical Perspectives on Chemistry*, Oxford University Press, Nueva York, 2000.

Brakel, J. van, "Über die Vernachlässigung der Philosophie der Chemie", en N. Psarros, K. Ruthenberg y J. Schummer (eds.), *Philosophie der Chemie: Bestandsaufnahme und Ausblick*, Königshausen & Neumann, Würzburg, 1996.

———, "On the Neglect of the Philosophy of Chemistry", *Foundations of Chemistry*, núm. 1, 1999, pp. 111-174.

———, *Philosophy of Chemistry. Between the Manifest and the Scientific Image*, Leuven University Press, Lovaina, 2000.

———, y H. Vermeeren, "On the Philosophy of Chemistry", *Philosophy Research Archives*, núm. 7, 1981, pp. 501-552.

Brock, W., "The Philosophy of Chemistry", *Ambix*, núm. 49, 2002, pp. 67-71.

Brush, S. G., "Dynamics of Theory Change in Chemistry", *Studies in History and Philosophy of Science*, vol. 30, 1999, pp. 21-79, 263-302.

Bunge, M., "Is Chemistry a Branch of Physics?", *Zeitschrift für allgemeine Wissenschaftstheorie*, núm. 13, 1982, pp. 209-223.

Burbidge, J. W., *Real Process: How Logic and Chemistry Combine in Hegel's Philosophy of Nature*, University of Toronto Press, Toronto, 1996.

Cahn, R. M., *Historische und philosophische Aspekte des Periodensystems der chemischen Elemente*, Hyle Publications, Karlsruhe, 2002.

Caldin, E. F., "Theories and the Development of Chemistry", *The British Journal for the Philosophy of Science*, núm. 10, 1959, pp. 209-222.

———, *The Structure of Chemistry in Relation to the Philosophy of Science*, Sheed & Wards, Londres/Nueva York, 1961 [reimpreso en *Hyle*, vol. 8, núm. 2, 2002, pp. 103-121].

Carrier, M., "Kants Theorie der Materie und ihre Wirkung auf die zeitgenössische Chemie", *Kantstudien*, vol. 81, núm. 2, 1990, pp. 170-210.

Christie, M., *The Ozone Layer: A Philosophy of Science Perspective*, Cambridge University Press, Cambridge, 2001.

Dagognet, F., *Tableaux et langages de la chimie*, Seuil, París, 1969.

Danaher, W. J., *Insight in Chemistry*, University Press of America, Lanham, Maryland, 1988.

Del Re, G., "The Historical Perspective and the Specificity of Chemistry", *Epistemologia*, núm. 10, 1987, pp.

231-240.

Duhem, P., *Mixture and Chemical Combination, and Related Essays*, edición y traducción de P. Needham, Kluwer, Dordrecht, 2002.

Earley, J. E. (ed.), *Chemical Explanation: Characteristics, Development, Autonomy*, New York Academy of Science (Anales de la Academia de Ciencia de Nueva York, vol. 988), Nueva York, 2003.

Engelhardt, D. V., *Hegel und die Chemie: Studie zur Philosophie und Wissenschaft der Natur um 1800*, Pressler, Wiesbaden, 1976.

Francoeur, E., *The Forgotten Tool: A Socio-historical Analysis of Mechanical Molecular Models*, tesis de doctorado, Universidad McGill, Montreal, 1998.

Gavroglu, K. (ed.), *Theoretical Chemistry in the Making: Appropriating Concepts and Legitimising Techniques*, número especial de *Studies in History and Philosophy of Modern Physics*, vol. 31, núm. 4, 2000.

Görs, B., *Chemischer Atomismus. Anwendung, Veränderung, Alternativen im deutschsprachigen Raum in der zweiten Hälfte des 19. Jahrhunderts*, ERS-Verlag, Berlín, 1999.

Hartmann, H., "Die Bedeutung quantenmechanischer Modelle für die Chemie", en *Sitzungsberichte der Johann Wolfgang Goethe-Universität*, F. Steiner, Wiesbaden, 1965, pp. 151-168.

Holmes, F. L., y T. H. Levere (eds.), *Instruments and Experimentation in the History of Chemistry*, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 2000.

Hoyningen-Huene, P., "Kuhn and the Chemical Revolution", en SILFS (ed.), *Atti del Convegno Triennale della SILFS, Roma, 3-5 de enero de 1996*, Edizioni ETS, Pisa, 1998, pp. 483-498.

Janich, P. (ed.), *Philosophische Perspektiven der Chemie*, Bibliographisches Institut, Mannheim, 1994.

———, y N. Psarros (eds.), *Die Sprache der Chemie*, Königshausen & Neumann, Würzburg, 1996.

———, y N. Psarros (eds.), *The Autonomy of Chemistry*, Königshausen & Neumann, Würzburg, 1998.

Klein, U., *Verbindung und Affinität: Die Grundlegung der Neuzeitlichen Chemie an der Wende vom 17. zum 18. Jahrhundert*, Birkhäuser, Basilea, 1994.

——— (ed.), *Tools and Modes of Representation in the Laboratory Sciences*, Kluwer, Dordrecht, 2001.

Kuhn, T. S., "Mathematical vs Experimental Traditions in the Development of the Physical Sciences", *The Journal of Interdisciplinary History*, núm. 7, 1976, pp. 1-31.

Laitko, H., "Chemie und Philosophie: Anmerkungen zur Entwicklung des Gebietes in der Geschichte der DDR", en N. Psarros, K. Ruthenberg y J. Schummer (eds.), *Philosophie der Chemie: Bestandsaufnahme und Ausblick*, Königshausen & Neumann, Würzburg, 1996, pp. 37-58.

———, y W. D. Sprung, *Chemie und Weltanschauung*, Urania, Leipzig, 1970, pp. 80-109.

Laszlo, P., *La Parole des choses ou le langage de la chimie*, Hermann, París, 1993.

Lévy, M., "Les relations entre chimie et physique et le problème de la réduction", *Epistemologia*, núm. 2, 1979, pp. 337-369.

Liegener, C., y G. del Re, "Chemistry vs. Physics, the Reduction Myth, and the Unity of Science", *Zeitschrift für allgemeine Wissenschaftstheorie*, núm. 18, 1987(a), pp. 165-174.

———, y G. del Re, "The Relation of Chemistry to Other Fields of Science: Atomism, Reductionism, and Inversion of Reduction", *Epistemologia*, núm. 10, 1987(b), pp. 269-283.

Mauskopf, S. H. (ed.), *Chemical Sciences in the Modern World*, University of Pennsylvania Press, Filadelfia, 1993.

McIntyre, L., y E. R. Scerri (eds.), *The Philosophy of Chemistry*, número especial de *Synthese*, vol. 111, núm. 3,

1997.

Mittasch, A., *Von der Chemie zur Philosophie*, Ebner, Ulm, 1948.

Mittelstraß, J., y G. Stock (eds.), *Chemie und Geisteswissenschaften: Versuch einer Annäherung*, Akademie Verlag, Berlín, 1992.

Morris, P. J. T. (ed.), *From Classical to Modern Chemistry. The Instrumental Revolution*, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2002.

Mosini, V. (ed.), *Philosophers in the Laboratory*, Accademia Nazionale di Scienze, Lettere ed Arti di Modena, Roma, 1996.

Neus, J., *Aromatizät: Geschichte und Mathematische Analyse eines fundamentalen chemischen Begriffs*, Hyle Publications, Karlsruhe, 2002.

Nye, M. J., *From Chemical Philosophy to Theoretical Chemistry. Dynamics of Matter and Dynamics of Disciplines 1800-1950*, University of California Press, Berkeley, 1993.

Paneth, F. A., "The Epistemological Status of the Chemical Concept of Element", *The British Journal for the Philosophy of Science*, núm. 13, 1962, pp. 1-14, 144-160 [publicado en alemán en 1931].

Polanyi, M., *Personal Knowledge: Towards a Post-Critical Philosophy*, University of Chicago Press, Chicago, 1958.

Primas, H., *Chemistry, Quantum Mechanics and Reductionism. Perspectives in Theoretical Chemistry*, Springer, Berlín/Heidelberg/Nueva York, 1981.

———, "Kann Chemie auf Physik reduziert werden?", *Chemie in unserer Zeit*, núm. 19, 1985, pp. 109-119, 160-166.

Psarros, N., *Die Chemie und ihre Methoden. Ein philosophische Betrachtung*, Wiley-VCH, Weinheim, 1999.

———, y K. Gavroglu (eds.), *Ars Mutandi: Issues in Philosophy and History of Chemistry*, Leipziger Universitätsverlag, Leipzig, 1999.

———, K. Ruthenberg y J. Schummer (eds.), *Philosophie der Chemie: Bestandsaufnahme und Ausblick*, Königshausen & Neumann, Würzburg, 1996.

Ramsey, J. L., "Recent Work in the History and Philosophy of Chemistry", *Perspectives on Science*, núm. 6, 1998, pp. 409-427.

Reinhardt, C. (ed.), *Chemical Sciences in the Twentieth Century: Bridging Boundaries*, Wiley-VCH, Weinheim, 2001.

Rheinberger, H. J., *Toward a History of Epistemic Things. Synthesizing Proteins in the Test Tube*, Stanford University Press, Stanford, 1997.

Rocke, A. J., "Kekulé, Buletrov, and the Historiography of the Theory of Chemical Structure", *The British Journal for the History of Science*, núm. 14, 1981, pp. 27-57.

Rothbart, D., y S. W. Slayden, "The Epistemology of a Spectrometer", *Philosophy of Science*, núm. 61, 1994, pp. 25-38.

Ruschig, U., *Hegels Logik und die Chimie. Fortlaufender Kommentar zum "realen Maß"*, Bouvier, Bonn, 1997.

Scerri, E. R., "The Electronic Configuration Model, Quantum Mechanics and Reduction", *The British Journal for the Philosophy of Science*, núm. 42, 1991, pp. 309-325.

———, "Has Chemistry Been at Least Approximately Reduced to Quantum Mechanics?", *PSA*, núm. 1, 1994, pp. 160-170.

———, "The Evolution of the Periodic System", *Scientific American*, vol. 379, núm. 3, 1998, pp. 56-61.

——— (ed.), *The Periodic System*, número especial de *Foundations of Chemistry*, vol. 3, núm. 2, 2001.
———, *The Story of the Periodic System*, McGraw-Hill, Nueva York (de próxima aparición).
Schummer, J., "Ist die Chemie eine schöne Kunst? Ein Beitrag zum Verhältnis von Kunst und Wissenschaft", *Zeitschrift für Ästhetik und allgemeine Kunstwissenschaft*, núm. 40, 1995, pp. 145-178.
———, *Realismus und Chemie. Philosophische Untersuchungen der Wissenschaft von den Stoffen*, Königshausen & Neumann, Würzburg, 1996(a).
———, "Bibliographie chemiephilosophischer Literatur der DDR", *Hyle*, núm. 2, 1996(b), pp. 2-11.
———, "Zur Semiotik der chemischen Zeichensprache: Die Repräsentation dynamischer Verhältnisse mit statischen Mitteln", en P. Janich y N. Psarros (eds.), *Die Sprache der Chemie*, Königshausen & Neumann, Würzburg, 1996(c), pp. 113-126.
———, "Scientometric Studies on Chemistry I: The Exponential Growth of Chemical Substances, 1800-1995", *Scientometrics*, núm. 39, 1997(a), pp. 107-123.
———, "Scientometric Studies on Chemistry II: Aims and Methods of Producing new Chemical Substances", *Scientometrics*, núm. 39, 1997(b), pp. 125-140.
———, "Towards a Philosophy of Chemistry", *Journal for General Philosophy of Science*, núm. 28, 1997(c), pp. 307-336.
———, "Challenging Standard Distinctions between Science and Technology: The Case of Preparative Chemistry", *Hyle*, núm. 3, 1997(d), pp. 81-94.
———, "The Chemical Chore of Chemistry I: A Conceptual Approach", *Hyle*, núm. 4, 1998(a), pp. 129-162.
———, "Physical Chemistry: Neither Fish nor Fowl?", en P. Janich y N. Psarros (eds.), *The Autonomy of Chemistry*, Königshausen & Neumann, Würzburg, 1998(b), pp. 135-138.
———, "Coping with the Growth of Chemical Knowledge: Challenges for Chemistry Documentation, Education, and Working Chemists", *Educación Química*, vol. 10, núm. 2, 1999, pp. 92-101.
Schummer, J., (ed.), *Models in Chemistry*, número especial de *Hyle*, vol. 5, núm. 2. ("Models in Theoretical Chemistry"); vol. 6, núm. 1 ("Molecular Models"); vol. 6, núm. 2 ("Modeling Complex Systems"), 1999-2000.
——— (ed.), *Ethics of Chemistry*, número especial de *Hyle*, vol. 7, núm. 2, y vol. 8 , núm. 1, 2001-2002.
———, "Aristotle on Technology and Nature", *Philosophia Naturalis*, núm. 38, 2001(a), pp. 105-120.
———, "Ethics of Chemical Synthesis", *Hyle*, núm. 7, 2001(b), pp. 103-124.
———, "The Impact of Instrumentation on Chemical Species Identity: From Chemical Substances to Molecular Species", en P. J. T. Morris (ed.), *From Classical to Modern Chemistry. The Instrumental Revolution*, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2002(a).
———, "Aesthetics of Chemical Products: Materials, Molecules, and Molecular Models", *Hyle*, núm. 9, 2003(a), pp. 73-104.
———, "The Notion of Nature in Chemistry", *Studies in History and Philosophy of Science*, núm. 34, 2003(b), pp. 705-736.
———, "The Philosophy of Chemistry", *Endeavour*, núm. 27, 2003(c), pp. 37-41.
———, "Why Do Chemists Perform Experiments?", en D. Sobczynska, P. Zeidler y E. Zielonacka-Lis (eds.), *Chemistry in the Philosophical Melting Pot*, Peter Lang, Fráncfort, 2004(a).
———, "Naturverhältnisse in der modernen Wirkstoff-Forschung", en K. Kornwachs (ed.), *Technik–System–Verantwortung*, LIT Verlag, Münster, 2004(b), pp. 629-638.

———, “Multidisciplinarity, Interdisciplinarity, and Patterns of Research Collaboration in Nanoscience and Nanotechnology, *Scientometrics*, núm. 59, 2004(c), pp. 425-465.

———, “Forschung für die Armen versus Forschung für die Reichen: Verteilungsgerechtigkeit als moralisches Kriterium zur Bewertung der angewandten Chemie”, en C. Sedmak (ed.), *Option für die Armen in den Wissenschaften*, Herder, Friburgo (de próxima aparición).

———, “Historical Roots of the ‘Mad Scientist’: Chemists in 19th-Century Literature”, *Ambix* (en preparación).

———, *Chemical Relations. Topics in the Philosophy of Chemistry* (manuscrito de libro en preparación).

Sobczynska, D., y P. Zeidler (eds.), *Chemia: Laboratorium, Mysli i Dzialan*, Wydawnictwo Naukowe Instytut Filozofii UAM, Poznań, 1999.

———, P. Zeidler y E. Zielonacka-Lis (eds.), *Chemistry in the Philosophical Melting Pot*, Peter Lang, Fráncfort, 2004.

Spector, T., y J. Schummer (eds.), *Aesthetics and Visualization in Chemistry*, número especial de *Hyle*, núm. 9, 2003.

Ströker, E., *Denkwege der Chemie. Elemente ihrer Wissenschaftstheorie*, Alber, Friburgo, 1967.

———, *Theoriewandel in der Wissenschaftsgeschichte: Chemie im 18. Jahrhundert*, Klostermann, Fráncfort, 1982.

Tague, J., J. Beheshti y L. Rees-Potter, “The Law of Exponential Growth: Evidence, Implications, and Forecasts”, *Library Trends*, núm. 30, 1981, pp. 125-150.

Theobald, D. W., “Some Considerations on the Philosophy of Chemistry”, *Chemical Society Reviews*, vol. 5, núm. 2, 1976, pp. 203-214.

Vasconi, P., *Sistema delle scienze naturali e unità della conoscenza nell'ultimo Kant*, Olschki, Florencia, 1999.

Vermeeren, H. P. W., “Controversies and Existence Claims in Chemistry: The Theory of Resonance”, *Synthese*, núm. 69, 1986, pp. 273-290.

Weininger, S. J., “The Molecular Structure Conundrum. Can Classical Chemistry Be Reduced to Quantum Chemistry?”, *Journal of Chemical Education*, núm. 61, 1984, pp. 939-944.

Woolley, R. G., “Must a Molecule Have a Shape?”, *Journal of the American Chemical Society*, núm. 100, 1978, pp. 1073-1078.

---

[*] Departamento de Filosofía, Universidad de Karlsruhe, js@hyle.org.

[1] Los lectores interesados pueden encontrar una bibliografía en línea, que el autor actualiza periódicamente, en http://www.hyle.org/service/biblio.htm.

[2] Un primer borrador de este capítulo se presentó como conferencia inaugural del VI Simposio de Verano sobre Filosofía de la Química, Washington, D. C., 4-8 de agosto de 2002.

[3] Algunos artículos de reseña anteriores son de Van Brakel y Vermeeren (1981); Van Brakel (1996; 1999; 2000, cap. 1); Ramsey (1998); Brock (2002); Schummer (2003c).

[4] Citado del sitio web de *INSPEC*.

[5] Citado del sitio web de *Biological Abstracts*.

[6] Esta sección y la segunda parte del capítulo citan a Schummer (2003c). Por razones de brevedad, las referencias bibliográficas se limitan en su mayoría a monografías y colecciones; pueden encontrarse más referencias en la bibliografía en línea citada en la nota 1.

[7] Desafortunadamente, aún no se revisa la literatura de la filosofía de la química en los países comunistas,

excepto la de la República Democrática Alemana; véase Laitko (1996). Una bibliografía se encuentra en Schummer (1996b).

[8] Puede consultarse el trasfondo histórico de los debates sobre las estructuras de resonancia en Rocke (1981). Para encontrar análisis filosóficos, véanse Laitko y Sprung (1970), pp. 80-109; Vermeeren (1986); Schummer (1996a, sección 6.5.2).

[9] Los lectores interesados pueden encontrar más información sobre los químicos mencionados en esta sección en la serie de *Hyle* Short Biographies of Philosophizing Chemists.

[10] Un ensayo anterior, obra de un químico teórico, que incluye muchas ideas críticas posteriores es Hartmann (1965).

[11] Hoyningen-Huene (1998) ha afirmado que la revolución química fue incluso el caso paradigmático que inspiró a Kuhn su noción de revoluciones científicas.

[12] Entre los historiadores que tienen evidentes intereses filosóficos están J. H. Brooke, W. Brock, M. P. Crosland, A. G. Debus, E. Farber, R. Hooykaas, D. Knight, T. H. Levere, A. N. Meldrum, H. Metzger, M. J. Nye, A. Rocke y muchos más.

[13] Dos publicaciones valiosas de estas iniciativas son Mittelstraß y Stock (1992), y Mauskopf (1993).

[14] Carrier (1990), Vasconi (1999), Van Brakel (2000, cap. 1.2).

[15] Engelhardt (1976), Burbidge (1996), Ruschig (1997).

[16] Por ejemplo, Danaher (1988), Janich y Psarros (1988), y Reinhardt (2001).

[17] Además de las mencionadas en otras partes, éstas incluyen Janich (1994); Psarros, Ruthenberg y Schummer (1996); Mosini (1996); McIntyre y Scerri (1997); Psarros y Gavroglu (1999); Sobczynska y Zeidler (1999); Bhushan y Rosenfeld (2000); Earley (2003), y Sobczynska, Zeidler y Zielonacka-Lis (2004).

[18] Entre los estudios filosóficos o históricos que, con extensión de libro, se ocupan de conceptos químicos están Klein (1994), Schummer (1996a), Psarros (1999), Görs (1999), Brush (1999), Van Brakel (2000) y Neus (2002).

[19] Baird (1993), Rothbart y Slayden (1994), Schummer (1996a, 1997a, 1997b, 2002a), Holmes y Levere (2000), Morris (2002) y Baird (2004).

[20] Laszlo (1993), Janich y Psarros (1996), Francoeur (1998), Schummer (1999-2000), Van Brakel (2000) y Klein (2001).

[21] Scerri (1998, 2001 y en preparación) y Cahn (2002).

[22] Por ejemplo, Nye (1993), Schummer (1998b) y Gavroglu (2000).

[23] Schummer (manuscrito de libro en preparación) hará una exposición integral de estos temas.

Segunda parte

LA QUÍMICA Y LA HISTORIA Y LA FILOSOFÍA DE LA CIENCIA

III. TEORÍA ARISTOTÉLICA DE LA REACCIÓN Y LAS SUSTANCIAS QUÍMICAS

PAUL NEEDHAM[*]

INTRODUCCIÓN

El propósito de este capítulo es formular la idea aristotélica de que una sustancia está presente en potencia, y no en acto, en una mezcla o combinación, y considerar algunos problemas que la idea suscita.[1] Esta concepción fue adoptada y adaptada por Duhem (1902) como base de su entendimiento de la diversidad de sustancias sistematizadas por las fórmulas químicas y para ofrecer lo que, a su juicio, era la interpretación natural de la materia según el enfoque de la termodinámica. La teoría de Aristóteles se sigue aquí desde esta perspectiva duhemiana, teniendo en cuenta su relación con las concepciones macroscópicas contemporáneas de sustancia química. Sin embargo, pese a las muchas propuestas y alusiones de Duhem, quedan cuestiones que deben resolverse si la interpretación ha de considerarse de algún modo definitiva.[2] Lo mismo puede decirse en gran medida de los propios textos aristotélicos, y los comentaristas más destacados han buscado llenar lo que se percibe como lagunas con reconstrucciones que como, por ejemplo, Freudenthal admite de entrada, "no son explícitas en los escritos de Aristóteles" (1995, p. 200).

Los aspectos en que Duhem insiste suponen un enfoque algo distinto del de Freudenthal, sobre todo en que es, dentro de una perspectiva de dos milenios y medio, inconfundiblemente moderno. Este punto de vista conscientemente anacrónico quizá no interese a los estudiosos de Aristóteles, pero muy bien podría atraer la atención de quienes sienten curiosidad por las raíces de la química moderna en una alternativa a las más familiares concepciones atomistas. El enfoque general de la teoría se centra en lo que puede seguir considerándose el problema apropiado, y las líneas generales de la crítica del trato que los atomistas dieron al problema pudieron aplicarse válidamente, en lo esencial, durante todo el siglo XIX. Una de tales líneas de crítica se centra en la idea de indivisibilidad, y no la abandonó hasta que los átomos llegaron a considerarse compuestos de otras varias entidades. Pero ésta no fue en absoluto la única línea de ataque. Las críticas fueron eclipsadas por la insistencia excesiva en la objeción positivista basada enteramente en la premisa de que los átomos no podían verse, lo que no tiene importancia en la disertación que sigue, como tampoco la tuvo para los interesantes oponentes decimonónicos del atomismo. La concepción aristotélica tiene, pues, más derecho a considerarse en continuidad con las opiniones modernas de lo que parece admitirse en general, y una evaluación crítica de sus méritos ilumina el desarrollo de la moderna concepción macroscópica de sustancia. En el presente capítulo se expone y se analiza la teoría aristotélica de la mezcla desde esta perspectiva.

Al exponer el problema que la teoría de sustancia debería abordar, Aristóteles tiene en cuenta varias doctrinas de sus predecesores. La teoría atómica de Leucipo y Demócrito se destaca como de mérito especial:

> Platón sólo investigó en qué condiciones se generan y perecen las cosas; y no trató *toda* la generación, sino sólo la de los elementos. No se preguntó cómo se generan la carne o los huesos, o cosa semejante […] En general, nadie excepto Demócrito se ha aplicado a ninguno de estos asuntos sino de manera superficial. Demócrito, en cambio, parece no sólo haber pensado en todos los problemas, sino distinguirse desde el principio por su método.

Mientras que otros "no dan descripción alguna de la combinación […] ni explican, por ejemplo, la acción y la pasión (cómo en las acciones naturales una cosa actúa y la otra sufre la acción)", Aristóteles reconoció que los atomistas tenían una clara idea de cómo abordar estas cuestiones:

> Demócrito y Leucipo, en cambio, postulan las "figuras", y hacen derivar de ellas la alteración y la generación. Explican la generación y la corrupción por su agregación y disgregación, pero la alteración por su orden y posición. Y como pensaban que la verdad radicaba en la apariencia, y las apariencias son contradictorias e infinitamente múltiples, postularon que las "figuras" son infinitas en número [*DG*, I, 2, 315a 29-315b 11].[3]

Aun así, su crítica es demoledora. Se podría considerar que consta de dos hilos, aunque íntimamente entrelazados: uno, que no se da ninguna descripción coherente de los fundamentales átomos o "indivisibles", y dos, que la teoría no trata el problema central: explicar cómo pueden aparecer compuestos nuevos, con propiedades nuevas, por efecto de mezclar. Me centraré en la segunda cuestión, la de explicar la aparición y desaparición de sustancias, y comentaré la primera sólo de paso. En vista de las aseveraciones de Lewis (1998) de que los atomistas presocráticos no sostenían que los átomos fuesen indivisibles, sino sólo que estaban indivisos, debe señalarse que la argumentación de Aristóteles contra los átomos no se agota de ningún modo con argumentos contra la imposibilidad de separar sus partes espaciales. Aunque la traducción lo hace referirse a los átomos como indivisibles, es posible que la indivisibilidad no esté en discusión.[4]

En la concepción atomista de la combinación, "los constituyentes sólo se combinan relativamente a la percepción; y mientras que algo está combinado para un perceptor, si su vista no es aguda, a los ojos de Linceo nada se combina" (*DG*, I, 10, 328a 13 y s.), de manera que las sustancias nos parecen mezcladas sólo porque no podemos distinguir sus partículas individuales yuxtapuestas. Si los ingredientes se conservaran así, la combinación no sería un estado físico objetivo de la materia, lo cual, a juicio de Aristóteles, no había razón para aceptar. De hecho, la opinión atomista no tiene una concepción real de sustancias químicas, sino que se limita a postular formas de átomos

"infinitas en número", como hemos visto, para explicar las apariencias "contradictorias e infinitamente múltiples". Aristóteles considera, por el contrario, que "es limitado el número de diferencias" (*Cael*, III, 4, 302b 31) que las distintas sustancias presentan, y una explicación de la variedad de compuestos debe basarse en un número de propiedades finito y de preferencia pequeño. Demócrito y Leucipo "nunca explicaron en detalle las formas de los varios elementos, [y] los principios que adoptan no son limitados en número, aunque tal limitación no exigiría ninguna otra alteración de su teoría" (*Cael*, III, 4, 303a 12-19). Estas propiedades primarias, como se les podría llamar, explicarían cómo el proceso de mezcla puede generar sustancias nuevas, dotadas de propiedades nuevas, con la cesación de las propiedades de los ingredientes originales. No es posible resolver "la paradoja de que la carne y los huesos y cualesquiera otros compuestos resulten de los elementos", como lo expresa un traductor, si el proceso se concibe como una simple "composición, tal como una pared se genera con ladrillos y piedras, [y que] esta 'mezcla' consista en los elementos conservados intactos pero dispuestos unos junto a otros en partículas diminutas" (*DG*, II, 7, 334a 20-21, 334a 26 y s.; traducción de Forster). Antes bien, según el entender de Aristóteles, el proceso de mezcla implica que una porción de materia afecta a otra, y las propiedades primarias son lo que confiere a la materia la capacidad para afectar y ser afectada por otra materia.

Las opiniones generales de Aristóteles sobre las capacidades y susceptibilidades de la materia se reflejan en su dificultad para entender la existencia de los átomos; porque si bien la postulación de éstos se proponía explicar los cambios producidos al mezclar distintas combinaciones de partículas que permanecen inalteradas, Aristóteles no concebía cómo podían describirse éstas de manera coherente sin atribuirles propiedades que les impedirían permanecer inalteradas:

> […] es imposible que [los indivisibles] no se afecten unos a otros; el indivisible ligeramente caliente, por ejemplo, sufre la acción de uno que lo supera mucho en calor. Además, si algún indivisible es duro, debe de haber también uno blando; pero el blando toma su nombre particular del hecho de que sufre cierta acción, pues blando es aquello que cede a la presión [*DG*, I, 8, 326a 11-15].

Aristóteles plantea un dilema: o bien los átomos se conservan intactos, y en tal caso no hay combinación, o bien hay combinación, caso en el cual los átomos no se conservan intactos. La noción de "combinación" que aquí se trata comprende la de cohesión, pero supone más que la simple aglutinación de partículas de materia; implica la idea de creación de una nueva *especie* de materia, caracterizada por propiedades que el material original no posee. ¿Cómo podría la simple yuxtaposición de cuerpos inertes generar nuevas propiedades?

Como la materia afecta y es afectada por la materia en virtud de ser de una u otra especie de sustancia, cabe preguntarse de qué están hechos los indivisibles y cómo determina esto su comportamiento. Una de las objeciones de Aristóteles a los átomos procede de la idea de que debían estar hechos de alguna sustancia, y de su rechazo de la idea de que una misma sustancia se separe naturalmente, como una mezcla heterogénea de agua y aceite, que son dos sustancias. Las porciones de una misma especie de materia

formarían un todo uniforme, como las gotas de agua cuando se tocan: "[…] si todos ellos [los indivisibles] son uniformes en la naturaleza, ¿qué los separó unos de otros? ¿O por qué, cuando entran en contacto, no se funden en uno solo, como las gotas de agua corren juntas cuando se tocan[…]?" (*DG*, I, 8, 326a 31-33). No obstante, si estuvieran hechos de distintas clases de materia, constituyendo una mezcla heterogénea, se encontrarían claramente divididos (y no sólo serían divisibles) en partes separadas. Deben ser uniformes. Pero entonces, ¿por qué cuerpos constituidos de manera uniforme se dividen en partículas de un tamaño y no de otro? Como dice Aristóteles, "¿por qué la indivisibilidad *como tal* es propiedad de los cuerpos pequeños y no de los grandes?" (*DG*, I, 8, 326a 23 y s.).

Aristóteles simplemente adopta la opinión de que algunas cantidades de materia son uniformes u homogéneas, mientras que otras son mezclas heterogéneas que presentan una separación natural en partes homogéneas. La uniformidad que la homogeneidad implica parece interpretarse como indicación de que se trata de una misma sustancia, y es requisito de los compuestos resultantes de mezclas que sean homogéneos, tal como los elementos mismos: "[…] si se ha producido la combinación, el compuesto *debe* ser uniforme: cualquier parte de tal compuesto es idéntica al todo, así como cualquier parte del agua es agua" (*DG*, I, 10, 328a 10 y s.), donde vuelve a tomarse el agua como paradigma. Pasajes como éste expresan claramente la opinión de que las sustancias solas son homogéneas o, como dice Aristóteles, homeómeras (literalmente, cuyas partes son como el todo). Esto se confirma por lo que dice a favor de rechazar la separabilidad natural de una misma sustancia. Lo que se entendería entonces por mezcla heterogénea, bifásica, de una misma sustancia —de hielo y agua líquida, digamos—, cuyas partes no son todas iguales, es ajeno a la visión aristotélica. Parece que las distintas fases se entendían como constitutivas de sustancias diversas, de modo que una sola sustancia constituye una sola fase. Además, el tenor general de su argumento indica sin duda que coincidía con la tesis inversa: que una sustancia sola está constituida por cantidades homogéneas. Dice, por ejemplo, que quienquiera que adopta "la opinión de Anaxágoras de que todos los cuerpos homeómeros son elementos […] malentiende el significado de elemento. La observación demuestra que aun los cuerpos mezclados suelen ser divisibles en partes homeómeras; ejemplos de ello son la carne, el hueso, la madera y la piedra" (*Cael*, III, 4, 302b 13-17). El hecho de que Aristóteles acepte que hay un problema evidente para explicar la diversidad de compuestos presupone que es posible reconocer fácilmente distintas sustancias como tales, y que el criterio de homogeneidad respecto a la mismidad de una sustancia ofrecería un medio para ello.

La distinción entre materia homogénea y heterogénea se deriva de características observables de lo que hoy se llamarían fenómenos macroscópicos. Pero sería un error entender que Aristóteles descarta el atomismo con base en que la fundamental falta de homogeneidad que atribuye a las mezclas no es directamente observable. El respeto de Aristóteles por la observación no excluía el enfoque teórico. Sin embargo, no veía ningún factor favorable a la opinión atomista que justificara contravenir la aparente homogeneidad de los cuerpos, y en cambio veía muchos factores adversos. Concibió un

enfoque propio como única manera de considerar y explicar lo que podía observarse. Más adelante los estoicos vislumbraron la posibilidad de un tercer punto de vista general, pero éste exigía negar la tesis, común a la concepción atomista y a la aristotélica, de la impenetrabilidad de la materia, negación que muchos filósofos han rechazado desde entonces. En todo caso es discutible (aunque esto no puede tratarse aquí) hasta qué grado consiguen hacer a un lado la postura de Aristóteles.[5]

Los requisitos de la concepción de Aristóteles de la mezcla, que como hemos visto cumplen una función importante en la crítica que de la teoría atomista hace en *DG*, I, 8, se exponen por primera vez en *DG*, I, 6. Las nuevas propiedades de los mixtos proceden de la interacción de contrarios cuando los cuerpos que los tienen se tocan. Las propiedades contrarias capaces de dar a la materia posibilidad para actuar y susceptibilidad de acción se limitan así a propiedades tangibles: aquellas que actúan en virtud del contacto en el espacio de los cuerpos que las poseen. En *DG*, II, 2 se sostiene que estos contrarios pueden reducirse a dos pares —húmedo y seco, caliente y frío—, de los que pueden derivarse los demás contrarios tangibles, como solidez y fluidez, pero que no son a su vez reductibles entre sí.

En tiempos mucho más recientes, los químicos han seguido basando sus explicaciones de las transformaciones de las sustancias en la interacción de contrarios. Los ácidos se contraponen con las bases, las sustancias electropositivas con las electronegativas, y así sucesivamente. No obstante, según el entender moderno, la gama de propiedades que Aristóteles consideró es limitada, cuando menos; e incluso dentro de los límites de esta gama, los argumentos a favor de la reducción de propiedades fundamentales de fase y demás a las cuatro cualidades primarias son, si no incomprensibles, poco convincentes. Aun en el alcance de visión de Aristóteles, la situación relativa, dentro de este esquema de reducción, de la levedad y la pesadez que presentan los movimientos naturales de los elementos en su traslado a distintas partes de la región sublunar permanece poco menos que en el misterio. Con todo, la estrategia general es bastante clara. Un cuerpo se calienta cuando entra en contacto con un cuerpo caliente, siempre que el primero esté frío, o siquiera menos caliente; y un cuerpo húmedo moja a otro cuando se tocan. Las cualidades primarias dan a la materia capacidad para actuar y para sufrir acción: la "acción" y la "pasión" en virtud de las cuales, al mezclar, ocurre algo que implica la desaparición de sustancias anteriores y la aparición de nuevas.

A grandes rasgos, la teoría de la mezcla de Aristóteles debe de parecerles muy familiar a los químicos modernos. Consideraciones generales de estabilidad determinan si es posible alguna reacción; y cuando es posible, hay otras consideraciones pertinentes a las circunstancias que determinan su velocidad. En lo referente a la "termodinámica general":

> Entre las cosas […] que son a la vez activas y pasivas, hay algunas fácilmente divisibles. Ahora bien, si una gran cantidad (o un gran volumen) de uno de estos materiales se juntara con un poco (o con una pequeña porción) de otro, el efecto producido no es combinación, sino aumento del dominante, porque el otro material se transforma en el dominante. (Por eso una gota de vino no se combina con diez mil galones de agua, ya que su forma se disuelve, y se cambia de modo que queda fundida en el volumen total de agua.) Por otra parte, cuando hay cierto equilibrio entre sus poderes, cada uno muda su naturaleza propia hacia el dominante; sin embargo, ninguno llega a ser el otro, sino que ambos se convierten en uno intermedio con propiedades comunes a los dos [*DG*, I, 10, 328a 24-30].

A continuación de este pasaje, Aristóteles señala que estas circunstancias son insuficientes para determinar la "cinética" de la mezcla:

> Queda claro, pues, que son combinables sólo los agentes que implican una contrariedad, porque éstos son tales que sufren acción recíprocamente. Más aún, se combinan más libremente si se yuxtaponen porciones pequeñas de cada uno; porque en estas condiciones se cambian uno al otro con mayor facilidad y rapidez, mientras que tal efecto tarda mucho cuando agente y paciente se presentan en abundancia [*DG*, I, 10, 328a 31-35].

En este pasaje se distinguen dos clases de interacción entre sustancias. A los lectores modernos la primera les resulta sin duda extraña, y escudriñan en vano los textos de Aristóteles en busca de respuesta a la pregunta que surge de inmediato: ¿exactamente cuánta diferencia de volumen se necesita para inclinar la balanza de la combinación a la aniquilación, como a veces dice Aristóteles, del ingrediente menos abundante por el otro? Incluso la noción de las cantidades relativas de material, y de la propiedad cuya magnitud da la medida de esta cantidad, es, como veremos, muy poco clara. Pero parece que aquí "abundancia" significa volumen, caso en el que cabe preguntar cómo se corresponde la existencia de procesos de esta primera clase con la aseveración inicial de que el contacto es prerrequisito de toda interacción. Dos cuerpos se tocan, parecería, por su superficie común. Una superficie común es, sin embargo, la misma para ambos cuerpos, sea cual fuere la proporción de sus volúmenes. En consecuencia, si superar cierta diferencia (¿o proporción?) de volumen es necesario y (a falta de obstáculo) suficiente para que ocurra determinada clase de interacción, y para impedir los efectos de otra, entonces la condición del contacto no puede interpretarse literalmente. Parece que ésta es la opinión de Aristóteles, ya que no relaja la condición de contacto.

El punto importante que esta condición presenta es que "el contacto *propiamente dicho* se aplica sólo a cosas que tienen posición" (*DG*, I, 6, 332b 32 y s.), y la imposición de la propiedad de ocupar una región del espacio excluye, por ejemplo, cualquier influencia de los números (Aristóteles pensaba que la concepción atomista de Leucipo y Demócrito "en cierto modo presenta las cosas como si fueran números o estuvieran compuestas de números. La exposición no es clara, pero tal es su verdadero significado" [*Cael*, III, 4, 303a 9 y s.]). Aunque Aristóteles dice a continuación que tocar "se define" como tener extremidades contiguas, pronto se echa de ver que no se atiene en absoluto a esta definición. Al contrario, tocar "en general se aplica a cosas que, teniendo posición, son tales que una puede impartir movimiento y la otra ser movida" (323a 23 y s.). Si se hubiera atenido estrictamente a la definición original, de ella se seguiría que tocar es una relación simétrica. Pero admite que, si bien "por regla general si A toca a B, B toca a A […], es posible […] que el motor apenas toque lo movido, y aquello que toca no necesita tocar una cosa por la cual es tocado" (323a 25 y ss.). Entonces, tocar se ha vuelto una relación general de afectación y, posiblemente, de ocasionar ser afectado, producida entre objetos que ocupan posiciones en el espacio y que quizá no están demasiado lejos. El pasaje recién citado plantea la posibilidad de tocar sin ser tocado, lo cual podría interpretarse como una afirmación de la tesis general

aristotélica de que todos los cambios pueden remontarse hasta un motor inmóvil. (Gill [1989, p. 199 y ss.] da el ejemplo del arte de la medicina, "localizado" en el alma del médico, que toca al paciente enfermo sin ser a su vez tocado.) Las interacciones de la primera clase, en las que un cuerpo aniquila a otro, parecerían ser casos de tocar sin ser tocado, porque cuando un cuerpo aniquila a otro no es afectado por su acción como uno que se combina con otro por un proceso de la segunda clase, descrito en el pasaje de *De la generación y la corrupción*, I, 10, ya citado.

La combinación supone una afectación mutua en la cual se alteran las cualidades primarias de los dos cuerpos que interactúan. Más adelante se resume la idea con mayor concisión: "[…] la carne y los huesos y otras cosas semejantes se generan cuando lo caliente se enfría y lo frío se calienta y alcanzan el término medio, pues en este punto no hay ni calor ni frío […] De manera similar, es en virtud de encontrarse en un estado 'medio' como lo seco y lo húmedo y tal producen carne y hueso y los demás compuestos" (*DG*, II, 7, 334b 25 y ss.; traducción de Forster). Cuando la proporción de volumen de las dos cantidades de materia está por debajo del umbral de aniquilación, los poderes sumados conferidos por las cualidades primarias pugnan por llegar a un término medio situado entre los valores originales. Los contrarios en pugna corresponden a distintos grados de una misma escala. Caliente y frío, por ejemplo, son dos extremos de la misma magnitud, llamémosla calor, y húmedo y seco, dos extremos de humedad. En términos modernos, las nociones primarias son básicamente relacionales, cosas con distinto grado de calor a las que se distingue en que una es más caliente o, a la inversa, más fría que la otra, y la otra noción primaria de humedad puede entenderse de modo parecido en cuanto relación de "una cosa más o menos húmeda que otra". No sólo lo que está muy caliente afecta lo que está apenas caliente o frío; en general, es posible que "lo ligeramente caliente […], por ejemplo, [sufra] la acción de [aquello] que lo supera mucho en calor" (*DG*, I, 8, 326a 12 y s.), y aunque cualquier cosa con cierto grado de una cualidad primaria sufra la acción de cualquier otra cosa con un grado distinto. Así, dos cuerpos cualesquiera de tamaño parecido, uno más caliente que el otro, pueden combinarse en un proceso de mezcla de la segunda clase y generar un tercer grado de calor, intermedio entre los dos originales, y por lo mismo distinto de ambos. Tal parece ser la concepción de Aristóteles de las nuevas propiedades que resultan de la combinación.

De estas consideraciones se sigue un corolario importante. Los compuestos generados por tales procesos de mezcla son homogéneos en el sentido que se explicó antes: "[…] si se ha producido la combinación, el compuesto *debe* ser uniforme: cualquier parte de tal compuesto es idéntica al todo, así como cualquier parte del agua es agua". La homogeneidad también se aplica a los ingredientes originales. (Si no, según la suposición citada, el ingrediente es una mezcla heterogénea, constituida por partes homogéneas, que son sustancias simples.) En consecuencia, *cada parte* del compuesto resultante presenta una nueva propiedad, reductible, según la opinión de Aristóteles, a nuevos grados de las escalas de calor y humedad. Ninguna parte presenta propiedad inicial alguna, y por tanto ninguna de las sustancias iniciales se conserva en el compuesto. Todas se han extinguido.

Aunque este importante corolario de la teoría aristotélica es consecuencia inevitable del requisito de homogeneidad, no depende de dicho requisito. La combinación, según Aristóteles, es un proceso surgido de la interacción de cuerpos en virtud de sus poderes y susceptibilidades de afectar y de ser afectados entre sí. Son precisamente las propiedades que confieren estos poderes y susceptibilidades lo que caracteriza a los ingredientes iniciales, y los cambios operados por la mezcla aseguran que las propiedades que al principio caracterizaban las porciones de materia como de una u otra especie de sustancia ya no prevalecen, y han sido remplazadas por otras que caracterizan una sustancia distinta. Su embestida contra los atomistas, hemos visto, fue que incluso las pequeñas partículas que conciben deben estar hechas de alguna sustancia, en virtud de la cual son susceptibles de modificación, por lo que no sobreviven intactas a la creación de sustancias nuevas. Es concebible que estos cambios pudieran incorporarse a una teoría que no exija que los productos de la mezcla sean estrictamente homogéneos.

Este corolario es un pilar central de la teoría de Aristóteles, y una manzana de la discordia fundamental para las teorías rivales. El filósofo le allana el camino, y a la doble teoría de la mezcla, al presentar su famosa distinción entre acto y potencia:

> No obstante, como algunas cosas *son en potencia* mientras que otras *son en acto*, los constituyentes pueden ser en un sentido y aun así no ser. Es posible que el compuesto *sea en acto* una cosa distinta de los constituyentes de los que ha resultado; sin embargo, es posible que cada uno de ellos siga *siendo en potencia* lo que era antes de que se combinaran, y que ambos subsistan sin destrucción [*DG*, I, 10, 327b 23 y ss.].

Es posible entonces que los ingredientes originales "sobrevivan" en la medida en que *pueden* recuperarse del compuesto. Se hace una aguda distinción entre esto y la separabilidad de los ingredientes como la concebían los atomistas: "La separación regresiva […] difiere de la reconstitución en que implica que los ingredientes estaban de algún modo presentes desde el principio" (Sorabji, 1988, p. 67). Algo debe tener la propiedad de ser potencialmente de la especie de una u otra de las sustancias originales, y es el material del compuesto que, como dice Aristóteles, "puede ser" de la especie de los constituyentes originales y sin embargo (en acto) no lo es. Lo anterior no es la absurda pretensión de que la materia del compuesto no tiene las propiedades específicas originales (corolario citado) y sin embargo las tiene. Es el postulado de que tal materia no tiene estas propiedades pero podría tenerlas. La formulación precisa de esta distinción formal merece, sin embargo, más atención, y se reanuda en la sección "¿Qué posee las potencialidades aristotélicas?", más adelante.

El segundo libro de *De la generación y la corrupción* comienza con el recordatorio de que "todavía tenemos que considerar los elementos" (*DG*, II, 1, 328b 32). Esta noción no desempeñó papel alguno en el desarrollo que hizo Aristóteles de las condiciones generales que gobiernan la generación y la corrupción de las sustancias en el primer libro. La combinación, en particular, se presentó como efecto, no de entrar en contacto cuerpos simples para formar cuerpos complejos, sino de tocarse cuerpos dotados de potencia para actuar y susceptibilidad de sufrir acción, y realizar estas potencias. Los elementos se definen por fin en II, 3, después de tratar algunas cuestiones preliminares.

Los preliminares establecen la pauta general a la que han de conformarse las definiciones de los elementos. Para empezar: "Nuestra doctrina es que si bien hay una materia de los cuerpos perceptibles (una materia de la cual se genera lo que comúnmente se llaman elementos), no tiene existencia separada, sino que siempre está estrechamente ligada a una contrariedad" (*DG*, II, 1, 329a 24 y s.). Aristóteles dice entonces que la materia "subyace a las cualidades contrarias, aunque es inseparable de ellas; porque lo caliente no es materia para lo frío ni lo frío para lo caliente, mientras que el *sustrato* es materia para ambos" (329a 30 y s.). Los estudiosos están divididos en cuanto a si el pasaje del que se han tomado estas citas compromete o no a Aristóteles con una doctrina de la materia primera. Me limito a observar que según Aristóteles lo que hay que definir son propiedades —las propiedades de ser tal o cual especie de elemento en el caso de las sustancias elementales— en relación con otras propiedades, lo que a su vez impone ciertas restricciones. Las propiedades tienen que predicarse de algo: el sujeto que las posee o, como él dice, subyace a ellas o es su sustrato. No es cuestión de aislar la materia subyacente en el sentido de "separarla" por entero de las propiedades que tiene. Así, una cantidad de materia puede designarse como aquello que posee tal o cual propiedad en un momento dado: aquello que está caliente, por ejemplo, o lo caliente para abreviar. Esto no supone que las propiedades que posee la materia sean características necesarias de ésta; las propiedades pueden adquirirse y perderse. Sin embargo, en ningún momento está la materia enteramente desprovista de propiedades. Las propiedades elementales, en particular, son transitorias. Aristóteles estaba de acuerdo con la doctrina de transmutabilidad de los elementos, y la materia del elemento recién destruido es aquella "de la cual" se genera el nuevo. Es concebible, en principio, que todas las propiedades (de determinado grupo) poseídas por una cantidad de materia cambien simultáneamente sin que haya jamás un momento en el que no se dé ninguna. Pero Aristóteles parece imponer restricciones. Los elementos, al menos, no pueden todos sufrir transmutación modificando al mismo tiempo todas las propiedades que los caracterizan, y algunos deben permanecer sin cambio mientras los otros se modifican. No obstante, bajo ninguna circunstancia podría el calor de un cuerpo, digamos, conservarse al tiempo que se cambia en su contrario. Durante un proceso en que el calor de un cuerpo disminuye, debe haber algo que posea cada uno de los distintos grados de calor. Y aunque tales cambios podrían describirse a grandes rasgos diciendo que las propiedades

de los cuerpos pueden cambiar, son los "cuerpos [los que] se transforman unos en otros […], mientras que las contrariedades no cambian" (329b 1 y s.). El cambio se da en la materia y supone la adquisición de propiedades de las que ésta carece; las propiedades no son lo que cambia.

"Materia" se usará aquí para referirse a aquello que posee propiedades de sustancia tales como las elementales, sin connotación alguna de las características que a veces se atribuyen a la comúnmente llamada materia primera, como la imperceptibilidad y la potencia pura. La materia es observable a menos que tenga dimensiones microscópicas, y está dotada de potencialidades en virtud de las propiedades que posee.

Por lo que hace a qué propiedades elementales han de definirse, Aristóteles da por cierto que deben tomarse de los contrarios, y procede a preguntar: "¿Cuáles y cuántas contrariedades han de considerarse principios de un cuerpo? […] Otros pensadores las dan por sentadas sin explicar por qué son justamente *ésas* y en *tal número"* (329b 3 y s.).

Aristóteles busca la explicación de las propiedades definitorias particulares de los elementos en algún rasgo distintivo de lo que explica la generación y la extinción en general, permitiéndoles entrar en una de las dos especies de reacción descritas en I, 10. En II, 2 asegura que, como ocurre con cualquier sustancia capaz de reaccionar, "los elementos deben ser recíprocamente activos y susceptibles, dado que se combinan y se transforman uno en otro" (329b 23 y s.). Además, "caliente y frío, seco y húmedo, son términos de los cuales el primer par implica *poder para actuar*, y el segundo, *susceptibilidad*" (329b 24 y s.). Arguye entonces que las demás características importantes se derivan del calor y la humedad, "pero éstas no admiten más reducción; porque lo caliente no es *esencialmente* húmedo o seco, ni lo frío y lo seco son formas derivadas una de otra ni de lo caliente y lo húmedo. De ahí que deban ser cuatro" (330b 25 y ss.). Por ende, las demás características relevantes se reducen a calor y humedad, y el rasgo distintivo de las propiedades elementales es que se definen en función de lo que más adelante llama "extremos contrarios" (*DG*, II, 8, 335a 8) de calor y humedad: lo muy caliente es lo que manifiesta el máximo grado posible de calor, etc. Esto explica, pues, por qué los principios son cuatro.

Las sustancias en general han de caracterizarse por propiedades que confieren el poder activo de afectar a otras y la susceptibilidad o capacidad pasiva de ser afectadas, y estas propiedades son derivables, según Aristóteles, de grados de las cualidades primarias: calor y humedad. Cuatro casos especiales son los valores extremos de estas escalas primarias: los grados máximo y mínimo de calor —caliente y frío— y de humedad —húmedo y seco—, que presumiblemente confieren poderes y susceptibilidades especialmente potentes. En todo caso, los grados extremos son lo que distingue a los elementos según los define Aristóteles en II, 3:

> Los cuatro términos pueden combinarse en seis pares. Sin embargo, los contrarios se niegan a juntarse, porque es imposible que una misma cosa sea caliente y fría, o húmeda y seca. Es evidente, pues, que los pares de elementos son cuatro: caliente con seco y húmedo con caliente; frío con seco y frío con

húmedo“ [*DG*, II, 3, 330a 30 y ss.].

Conque hay exactamente cuatro elementos, fuego, aire, tierra y agua, que corresponden, respectivamente, a los pares citados. Aristóteles dice a continuación de los elementos que son simples, y al hacerlo se remite a una idea generalmente aceptada por "todos los que hacen elementos de los cuerpos simples" (330b 7). Tal como criticó que sus predecesores no hubieran explicado las propiedades elementales que postulaban, así también habría podido poner en duda su concepción de simplicidad, pero extrañamente no lo hace en *De la generación y la corrupción*, donde sigue diciendo que los elementos son simples pese a que la definición que acaba de dar de ellos no se ajusta a semejante noción. Esto debe de extrañar bastante al lector contemporáneo. Cuando Lavoisier introdujo la definición moderna de elemento como "el último punto que el análisis es capaz de alcanzar", insistió en que no puede haber más restricciones ni en el número ni en el carácter de los elementos; "debemos admitir como elementos todas las sustancias a las que podamos reducir, por cualquier medio, los cuerpos por descomposición" (1789, p. xxiv). Criticó en consecuencia la doctrina aristotélica de los cuatro elementos. Si adoptamos un procedimiento —el de definir los elementos como aquello que ya no se puede descomponer, o definirlos con base en otras consideraciones, por ejemplo, la posesión de contrarios extremos como hace Aristóteles en *De la generación y la corrupción*—, entonces no es razonable, al parecer, que adoptemos el otro. No es que obrar de otra manera implique necesariamente una contradicción, pero se debe dejar abierta la pregunta de si lo que cumple las condiciones impuestas por una definición también cumple las de la otra, y no tomar una decisión *a priori*. No obstante, Aristóteles hace precisamente eso: propone en otra obra, *Del cielo*, una definición de la idea general de elemento más afín a la de Lavoisier. Aun así, la noción aristotélica de simplicidad es profundamente problemática. El tema se retoma en la sección "Sustancias simples", más adelante.

Éste no es el único punto de conflicto con la concepción de Lavoisier. Tras definir los elementos, Aristóteles les atribuye una característica que los distingue radicalmente de lo que Lavoisier entendía por elemento. El tema del siguiente capítulo comienza con la aseveración de que "es evidente que todos ellos son por naturaleza tales que se convierten en otros" (*DG*, II, 4, 331a 13), y decide "explicar la manera de su transformación recíproca, y si todos ellos pueden generarse de todos" (331a 11 y s.). Los cuerpos que tienen propiedades contrarias se afectan naturalmente entre sí, y Aristóteles vuelve la atención enseguida a consideraciones relativas al ritmo del cambio: "[…] es más fácil que cambie una sola cosa que no que cambien muchas. El Aire, por ejemplo, puede resultar del Fuego si cambia una sola cualidad; porque el Fuego, como hemos visto, es caliente y seco, mientras que el Aire es caliente y húmedo, por lo que, si lo húmedo vence a lo seco, habrá Aire. Por otra parte, el Agua puede resultar del Aire si lo frío vence a lo caliente […]" (*DG*, II, 4, 331a 25-30). En general, cualquier elemento puede transformarse en otro que tenga un rasgo distintivo en común. De hecho, cualquier elemento puede transmutarse en otro. Sin embargo, "la transformación del Fuego en

Agua y del Aire en Tierra, así como del Agua y la Tierra en Fuego y Aire, aunque es posible, es más difícil porque supone el cambio de más cualidades. Porque si del Agua ha de resultar Fuego, deben extinguirse tanto lo frío como lo húmedo […] De ahí que este segundo método de generación lleve más tiempo" (*DG*, II, 4, 331b 4-11).

Gill postula que las transmutaciones de esta última clase son más lentas porque la continuidad exige que los dos contrarios en cuestión cambien de manera consecutiva y no simultánea: "[…] primero, se puede vencer la sequedad del fuego para dar un aire transitorio, y entonces vencer el calor para producir agua; igualmente es posible vencer primero el calor del fuego para dar una tierra transitoria […]" (1989, p. 74). Se podría pensar que la idea de continuidad, además de requerir que toda sustancia transitoria sea elemental, requiere que haya cambios sucesivos a través de todos los grados intermedios. Cierta cantidad de agua, digamos, podría transformarse en aire pasando toda ella sucesivamente por todos los grados de calor, de manera que ninguna parte de ella sea de especie elemental alguna durante el periodo de transición. Sin embargo, en estos pasajes de II, 4 se resuelve cuál de las dos clases de proceso de transformación descritas en I, 10 ocurre en la transmutación. La transmutación es un proceso de la primera clase, en el cual una porción de materia de cierta especie es lo bastante mayor en tamaño que la otra porción de materia de distinta especie para que las cualidades primarias de la primera aniquilen a las de la segunda y no se realice ningún grado intermedio. (En I, 10 parece que al conjuntarse las propiedades que constituyen una especie de sustancia, sea o no sea elemental, se aniquilan simultáneamente; pero en II, 4 lo que está en cuestión es el aniquilamiento de los extremos de calor y humedad uno por uno.) No queda claro cómo semejante transformación discontinua podría ser otra cosa que instantánea, ya que no hay fases intermedias por las cuales pasar; pero esto también parece decir algo sobre el tamaño de las partículas, el cual, según vimos en la sección "Concepción aristotélica de los elementos", es un factor que gobierna el ritmo de transformación. Aristóteles dice, por ejemplo, que "si el agua se ha disociado primero en gotas más menudas, de ella se genera aire más rápido; mientras que si antes se han asociado gotas de agua, el aire se genera más despacio" (*DG*, I, 2, 317a 27-30). Quizá ciertas partes de la cantidad aniquiladora que son suficientemente mayores que determinadas partes de la cantidad aniquilada y están en contacto lo bastante estrecho con ellas aniquilan primero. Luego otras partes pueden colocarse en la posición idónea y aniquilar, de modo que la transformación completa en efecto se produzca en una serie de fases temporalmente ordenada. De acuerdo con esta descripción, es la división de las cantidades lo que explica el ritmo de la transformación. Pero si el proceso ocurre por fases, ¿por qué no puede la cantidad convertida en elemento transitorio en la primera fase transformarse en el elemento final al tiempo que se produce la segunda fase de transformación de otra parte en el elemento transitorio, y así sucesivamente? En ese caso, las transformaciones del fuego en agua y del aire en tierra no tendrían por qué ser mucho más lentas que las demás transmutaciones elementales.

No me queda claro que se pueda elegir entre alternativas como éstas con base en los textos de Aristóteles, ni que sea distinguible en qué basó el filósofo los varios asertos

sobre los distintos ritmos de transformación que expresa en *DG*, II, 4. No obstante, por extraño que nos parezca, Aristóteles daba por cierto que se refería a un fenómeno "evidente", observable en los hechos de todos los días. La conversión de agua en aire es el modo en que Aristóteles concibe la evaporación, la cual, de acuerdo con su teoría, se produce más rápido que la conversión de agua en fuego cuando queda expuesta a un exceso de este último; la solidificación implica la generación de tierra; la combustión, la conversión de tierra en fuego, la cual es también más rápida que la conversión de agua en fuego.

Según la concepción posterior a Lavoisier, suele entenderse que los elementos se conservan durante la transformación química. Pero del corolario general de la sección "Concepción aristotélica de los elementos" se infiere que según la teoría de Aristóteles, cuando los elementos se combinan para formar compuestos por un proceso de mezcla de la segunda clase, no se conservan en el compuesto resultante. Y ahora hemos visto que son susceptibles de otra clase de transformación: transmutarse en otros elementos como consecuencia de un proceso de mezcla de la primera clase. Según el modo de ver aristotélico los elementos son tan efímeros como cualquier otra clase de sustancia. Con independencia de lo que se diga de esta doctrina, no hay que confundirla con la negación de la persistencia de la materia. Aunque las ideas de conservación de las especies elementales y de persistencia de la materia están íntimamente asociadas en la concepción posterior a Lavoisier, Aristóteles anticipó ampliamente la distinción de una y otra, de manera que no se le puede criticar el haber negado incoherentemente la persistencia sobre la base de negar la conservación de los elementos. Lo anterior es fundamental en la presente interpretación y conviene decirlo claramente.

Cuando el agua se vuelve aire, por ejemplo, aquello que era agua y era, por tanto, frío y húmedo *es idéntico a* aquello que después es aire y es, por tanto, caliente y húmedo. Las cualidades primarias caliente, frío, húmedo y seco son, pues, propiedades que pueden aplicarse en un tiempo, t, y no en otro, t', a porciones o —en el lenguaje usado en las disertaciones de lógica de términos de masa— cantidades[6] de materia π, ρ, σ, etc. Las relaciones primitivas de calor y humedad respecto a las cuales se definen los contrarios extremos también han de entenderse, en consecuencia, como relaciones dependientes del tiempo, siendo π tan caliente como ρ, por ejemplo, en un tiempo t. [7] Así, definir el agua es cuestión de definir una propiedad como:

π es agua en t si, y sólo si, π es frío en t y π es húmedo en t,

y el aire como

π es aire en t si, y sólo si, π es caliente en t y π es húmedo en t,

y así sucesivamente. En consecuencia, una transmutación de agua en aire implicaría la verdad de una proposición del tipo "π es agua en t y π es aire en t' ", donde t' es posterior a t, pero el mismo objeto, π, posee las distintas propiedades.

Puede decirse que la persistencia de la materia, interpretada en cuanto identidad de lo que sufre cambio, es lo que tratan los pasajes que Van Brakel (1997, p. 258 y nota 14) cita en apoyo de su aseveración de que la opinión general desde Aristóteles ha sido que "el agua en todas sus manifestaciones (líquida, sólida, vapor) es la misma sustancia". Con una excepción (la de *Problemas*), los diversos pasajes que menciona Van Brakel se toman de la *Meteorología*. El que Van Brakel cita es el que parece estar en mayor conflicto con la concepción de transmutación de los elementos antes descrita: "[…] el agua mejor y más dulce cada día […] se disuelve en vapor y asciende a la región superior, donde se condensa por el frío y vuelve a caer a la tierra". Pero la contextualización del pasaje deja claro que a juicio Aristóteles el cambio implica generación y destrucción: "[…] el sol […] por su movimiento produce cambio, generación y destrucción: hace subir el agua mejor y más dulce cada día, y la hace disolverse en vapor y ascender a la región superior, donde se condensa por el frío y vuelve a caer a la tierra" (*Meteor*, II, 2, 354b 6 y ss.; traducción de Lee). El "la" de "la hace disolverse en vapor" se interpreta naturalmente como referido a *aquello* que es "el agua mejor y más dulce", lo cual no supone necesariamente la conservación de la *propiedad* de ser agua. Es aquello que pierde estas propiedades y se vuelve vapor. El hecho de referirse a la disolución de aquello corresponde con lo que se ha dicho acerca de que el mecanismo de transmutación implica un proceso de mezcla de la primera clase. [8] En términos más generales, Aristóteles arguye que "[los elementos] no pueden ser eternos, porque tanto el fuego como el agua y, de hecho, cada uno de los cuerpos simples, se observan en proceso de disolución" (*Cael*, III, 6, 304b 26 y s.). Sin embargo, la cuestión no queda tan decidida, y llama la atención hacia algunas de las discrepancias que surgen al comparar los diversos textos de Aristóteles.

Van Brakel podría responder señalando que dos capítulos más adelante Aristóteles dice a qué se refiere con vapor, a saber, que "el vapor […] es húmedo y frío" (360a 22 y s.), es decir, que tiene las características definitorias del agua. No obstante, una vez más el contexto más amplio desbarata el cuadro. El aire en la *Meteorología* no es el elemento simple descrito en *De la generación y la corrupción*, sino una mezcla de vapor y humo. Se recurre a esta última sustancia porque "es absurdo suponer que el aire que nos rodea se vuelva viento por el solo hecho de moverse" (*Meteor*, II, 4, 360a 26 y s.; traducción de Lee). No es necesario abordar los detalles de la teoría aristotélica de los vientos. Sin embargo, aun en *De la generación y la corrupción* hay un comentario sin elaborar en II, 3, donde se dan las definiciones de los cuatro elementos, que sugiere la imposición de más restricciones al número de éstos —"el Fuego y la Tierra […] son extremos y de suprema pureza; el Agua y el Aire, al contrario, son intermedios y más combinados" (II, 3, 330b 34 y s.)—, si bien esto coloca al agua y al aire en situación de igualdad por lo que hace a su condición elemental. Como está expresado, sin embargo, lo anterior quizá sea tan sólo una manera defectuosa de decir que aquello que ocupa la región intermedia entre el centro ocupado por la tierra y la región superior ocupada por el fuego no es en

realidad agua y aire, sino mezclas que son menos acuosas (como el agua) o aéreas de lo que la materia de abajo es térrea y la de arriba ígnea.

Con todo, la *Meteorología* sin duda va un paso más adelante. En ella se sostiene que "el Aire […] está hecho de estos dos componentes: vapor, que es húmedo y frío […], y humo, que es caliente y seco; por lo que el Aire, al estar compuesto de factores en cierto modo complementarios, es húmedo y caliente" (*Meteor*, II, 4, 360a 21 y ss.; traducción de Lee). Queda sin explicar, no obstante, por qué han de anularse los contrarios frío y seco en particular, y no el otro par. Parecería también que la teoría de los vientos requiere que el aire no sea homogéneo, y que los dos componentes formen una yuxtaposición en vez de un compuesto. La anulación de contrarios recién mencionada no sería, pues, un fenómeno local, vigente en todas las partes del aire, sino un fenómeno a gran escala, perceptible sólo a alguien incapaz de discernir entre las partes de diferente caracterización. Esta doctrina parece radicalmente distinta de la teoría que se desarrolla en *De la generación y la corrupción*. Y en *Del cielo*, III, 7, mientras arguye contra la concepción atomista, Aristóteles de hecho disputa la tesis de que "el agua es un cuerpo presente en el aire y expelido por el aire" sosteniendo que "el aire se vuelve más pesado cuando se convierte en agua" (305b 9 y s.). Cualquier suposición de que el aire de *De la generación y la corrupción* y *Del cielo* es una noción teórica, a diferencia de la sustancia observable tratada en la *Meteorología*, debe tener en cuenta las frecuentes exhortaciones a la observación para descartar opiniones alternativas en las dos primeras obras, como la de *Cael*, IV, 5, 312b 34 y ss. y los pasajes citados antes en relación con este asunto.

La *Meteorología* es un estudio de los fenómenos que ocurren en la región sublunar: de "todo cuanto ocurre naturalmente, pero con una regularidad menor que la del elemento primario (nota del traductor [al inglés]: el quinto elemento del que están hechos los cuerpos celestes y sus esferas) de las cosas materiales" (*Meteor*, I, 1, 338b 20 y s.; traducción de Lee). El libro está concebido desde el principio como un desarrollo de la teoría general de la materia y el cambio expuesta en la *Física* y en *De la generación y la corrupción*. Pero parece que, en su afán por abarcar estos fenómenos, Aristóteles amplió su teoría original más allá de los límites de la congruencia. Así, es dudoso que todo aquello favorable a la idea de que el agua conserva su cualidad de agua cuando se convierte en aire en la *Meteorología* puede considerarse una elaboración directa de las doctrinas de *De la generación y la corrupción* y *Del cielo*. En estas dos últimas obras también hay discrepancias, a las que nos referiremos a continuación, pero es más fácil ver éstas como ideas complementarias unas de otras.

Según el desarrollo de las ideas de Aristóteles en *De la generación y la corrupción*, la noción de elemento se caracteriza con respecto a las propiedades que determinan cómo reaccionan las sustancias entre sí para generar nuevas sustancias. De acuerdo con la concepción aristotélica, tales propiedades se realizan en grados variables, y todas son reductibles a dos magnitudes primarias. Los elementos se distinguen por el hecho de que adquieren valores extremos o limitantes de estas cualidades subyacentes. Por lo demás, comparten con las otras sustancias capaces de entrar en procesos o reacciones de mezcla la característica de no hallarse presentes en compuestos, por lo que ninguna parte de éstos tiene las características definitorias de los elementos. En consecuencia, los elementos se caracterizan por aspectos que presentan sólo en aislamiento. Otras teorías de los elementos podrán considerarlos más extendidos, pero para Aristóteles un elemento es tal sólo cuando está aislado. Otra noción que Aristóteles asocia con la idea de elemento, la de la simplicidad, se ha mencionado sin integrarla a la exposición. Es hora de considerar cómo hacer esto.

La simplicidad normalmente se toma como característica que distingue a los elementos de otras sustancias en virtud de una idea de composición: las sustancias simples son aquellas que no están compuestas de ninguna otra sustancia. ¿Puede Aristóteles recurrir a tal noción dado aquello a lo que su teoría lo sujeta según se resume en el párrafo anterior? Parece que la idea es válida sólo en teorías como la de los atomistas y los estoicos, según las cuales los componentes originales se conservan incluso en la mezcla más íntima. Como Aristóteles considera que los ingredientes originales no están presentes en un compuesto, se diría que no puede hablar de componentes de un compuesto ni, en consecuencia, de distinguir entre sustancias simples y complejas contrastando sustancias compuestas o no compuestas de otras sustancias.

Es evidente que Aristóteles disentía. Llega al extremo de declarar que "todo compuesto incluye todos los cuerpos simples" (*DG*, II, 8, 335a 9). Esto de inmediato plantea la pregunta adicional de qué distingue a determinado compuesto de otro si todos se parecen en que están constituidos por los cuatro elementos. Se distinguen, según la concepción de mezcla desarrollada en *De la generación y la corrupción*, por sus diferentes grados de calor y humedad y, para que esta nueva idea se sostenga, a las características anteriores debe corresponder alguna diferencia de constitución. En I, 10 Aristóteles contrasta un compuesto con una yuxtaposición no homogénea, cuyas partes no "presentan la misma proporción entre sus constituyentes que el todo" (328a 9), lo cual indica que las proporciones de los elementos componentes pueden distinguirse y son características de determinadas especies de compuesto. La declaración de II, 8 se presenta hacia el final de *De la generación y la corrupción*, donde Aristóteles resume su teoría sin introducir con cuidado la nueva idea en el esquema —pese a la mención pasajera de las proporciones en I, 10—, como había hecho con otros aspectos de la teoría. ¿Es la idea siquiera compatible con el resto de la teoría? Sin duda la noción de composición de que se trata no puede ser la de que ésta consta de diversas sustancias en

cuanto partes, lo cual queda descartado por el corolario expuesto en la sección "La teoría aristotélica de la mezcla". Debe implicar la noción de potencialidad. Un componente debe ser una sustancia que puede obtenerse de un compuesto. Pero debe haber algo más, dado que los elementos no se distinguen de los compuestos en cuanto a su disposición para volverse otras sustancias. Cualquier sustancia puede entrar en un proceso de mezcla (de la primera o la segunda clase) y convertirse por entero en otra; los elementos no son la excepción.

En la exposición aristotélica de los elementos en *Del cielo*, la idea principal es precisamente la distinción entre simple y complejo, y no lo que gobierna los procesos de mezcla como en *De la generación y la corrupción*. "Suponemos que un elemento es un cuerpo en el que es posible analizar otros cuerpos, que está presente en ellos en potencia o en acto (aún es discutible en cuál), y que a su vez no es divisible en cuerpos diferentes en forma. Esto, o algo parecido, es lo que todos los hombres entienden en cualquier caso por elemento" (*Cael*, III, 3, 302a 15 y ss.). Ésta no es la manera en que la noción de elemento se introdujo en *De la generación y la corrupción*. Aun así, dada la referencia allí a cuerpos simples, y aquí a todos los hombres, pero sobre todo a la presencia potencial, se presume que es consecuente con ella. El problema planteado al final del párrafo anterior se aborda en *Del cielo* con la aseveración de que "la carne y la madera y los demás cuerpos semejantes contienen fuego y tierra en potencia, pues se ve que exudan estos elementos; por otra parte, el fuego no contiene carne o madera ni en potencia ni en acto, pues de lo contrario los exudaría" (*Cael*, III, 3, 302a 20 y ss.). La idea es, presumiblemente, que una cantidad de carne pura puede convertirse en una cantidad que es en parte fuego y en parte tierra, y que estas partes ocupan regiones separadas en el espacio. Por otro lado, partiendo de una porción de fuego, y *sin la adición de ninguna otra materia*, no es posible obtener carne o madera. Así como Gill señala que "la tierra es en potencia barro y en potencia madera" (1989, p. 150), un tanto de fuego puede convertirse en carne y madera, pero sólo mezclándolo con otra cantidad de materia; pues persiste el hecho de que, según la concepción aristotélica, lo que es carne y madera puede volverse fuego y tierra, y lo que es fuego y tierra puede volverse carne y madera. Parece, no obstante, que la teoría de la mezcla ha de interpretarse en el sentido de que la conversión de una especie de sustancia en otra sólo es posible por un proceso de *mezcla* (sea de la primera o de la segunda clase). De cualquier forma, en la medida en que no queda claro si Aristóteles concibe un proceso físico de calentamiento que no sea un proceso de mezcla de la primera o la segunda clase, hay que tener cuidado de no atribuir a su teoría nuestra noción de descomposición por calentamiento. En tal caso, el hecho de que las partes de una cantidad de cierta especie no se conviertan en ninguna otra sin la adición de cualquier otra cantidad de materia difícilmente distingue a los elementos, y la dificultad de explicar la noción aristotélica de componentes radica sobre todo en la idea de proporción de éstos. Pero sin el uso que Lavoisier hace de la noción de masa para medir las cantidades de distintos elementos que constituyen cierta cantidad de compuesto, no es fácil ver las implicaciones prácticas de esta idea. Desde luego, ninguna de las opiniones a las que Aristóteles se opuso era mejor a este respecto.

Al margen de las cuestiones prácticas, la concepción teórica aristotélica de los componentes podría describirse en los siguientes términos. Una cantidad que es un compuesto de cierta especie es un cuerpo homogéneo con grados específicos de calor y humedad situados entre los valores extremos posibles de estas magnitudes. Una especie de compuesto tiene un grado característico de calor, *c*, y de humedad, *h*, y puede denotarse con un par *(c, h*), cualquier cantidad del cual se representa con un punto *O* en la figura III.1. Un cuerpo de esta especie podría ser resultado de un proceso de mezcla de la segunda clase en el que entraran ingredientes iniciales de las especies *(c′, h′*) y *(c″, h″*), representados, respectivamente, por los puntos *O' y O"*. El grado *c* es intermedio entre *c′* y *c″*, y el *h* entre *h′* y *h″*, presumiblemente[9] en relación con cuánta de cada una de las especies de sustancia iniciales se mezclaron. En los textos de Aristóteles no se especifica cómo determinar esto exactamente —en relación con qué cualidad medible puede describirse la cantidad de cada porción—, y no podemos hacer otra cosa que adivinar en qué estaba pensando. Pero consideremos cómo podría abordarse el problema dentro del marco aristotélico.

Quizá los ingredientes originales puedan recuperarse de la cantidad de especie *(c, h*). Pero no hay razón para suponer que es posible sólo una clase de conversión en distintas sustancias. Así ocurre con la concepción moderna de los compuestos, que podrían descomponerse en distintos conjuntos de compuestos de diversas maneras, según la cual sólo es única la descomposición completa en elementos. Así también, la idea de Aristóteles parece ser que cualquier compuesto puede dividirse por completo en sustancias que tienen grados extremos de las magnitudes primarias, es decir, los elementos, representados por las esquinas del diagrama. ¿Pero hay alguna razón, aun en este caso, para pensar que el análisis sería único? Supongamos que mezclar agua con tierra en determinadas proporciones dé una porción de grado de humedad *h*. La adición posterior de aire podría llevarla al grado de calor *c*. Pero esta misma combinación de grados de calor y humedad podría realizarse también usando menos aire y algo de fuego, y menos de la cantidad original de tierra para compensar la sequedad adicional que el fuego aporta. En suma, dos variables independientes *c* y *h* son insuficientes para determinar tres proporciones independientes de cuatro elementos.

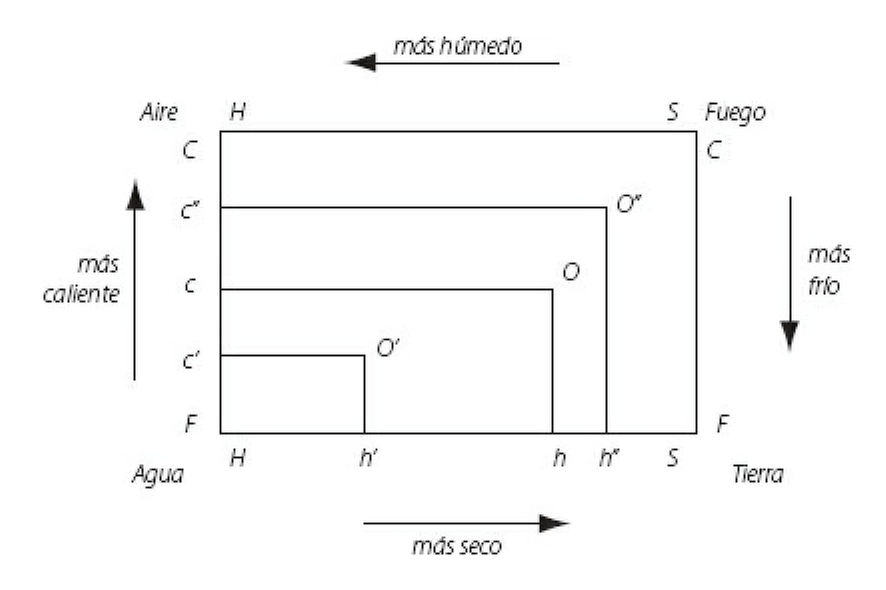


FIGURA III.1. *Compuestos aristotélicos.*

Es difícil saber cómo completar la exposición dando por válidas todas las tesis de Aristóteles sobre elementos y compuestos. Además, cualquier elaboración semejante iría contra la opinión ampliamente aceptada de que Aristóteles no tenía noción de medida de la cantidad de materia (Jammer, 1997, p. 19). ¿Pero cómo interpretar entonces la referencia explícita (aunque poco desarrollada) a la "proporción entre sus constituyentes" hecha en *De la generación y la corrupción*, I, 10 (y varias en la *Meteorología*, IV a sustancias constituidas de manera predominante, o en mayor o menor medida, por uno u otro elemento)? Sin tal noción, es difícil entender cómo podría haber una diversidad de compuestos si en todos ellos han de encontrarse todas las sustancias simples. Conviene advertir que esta restricción por lo demás arbitraria podría justificarse en cierto modo en relación con la situación representada en la figura III.1. Deben intervenir al menos tres elementos para que tanto el calor como la humedad adopten valores intermedios, y quizá sea natural pensar que una resolución única de los grados intermedios característicos de un compuesto en grados extremos implicaría a los cuatro elementos. Pero en tal caso alguna magnitud adicional debería contribuir al análisis.

En los textos aristotélicos hay indicaciones de una solución al problema de las proporciones elementales, que vale la pena recuperar por las cuestiones que podrían resolver, pese a las objeciones planteadas contra la interpretación de Aristóteles. Aun así, estas indicaciones se han entendido de distintas maneras. Considérese un problema formulado por Freudenthal (1995), quien da por sentado desde el principio que Aristóteles tiene una noción definida de componentes elementales *conservados* en un compuesto. Al decir de Freudenthal, esto de inmediato plantea un problema de estabilidad. La conservación de un compuesto está amenazada, según esta suposición, por el conflicto entre las características definitorias opuestas de los elementos, y también por la tendencia inherente a éstos a alejarse hacia distintas partes del universo.[10] Duhem, destacado exponente de la termodinámica, estaba muy consciente del problema de la estabilidad, que esta ciencia aborda describiendo condiciones de equilibrio bajo

restricciones prevalentes. Este problema da una idea de por qué es posible que Duhem se haya sentido atraído por la concepción aristotélica según la cual, a su juicio, "los elementos […] dejan de existir en el momento en que se crea el mixto, y el mixto homogéneo cuya mínima parte contiene los elementos en potencia […] puede regenerarlos mediante la corrupción apropiada" (1902, p. 182). Según este entendimiento, no puede haber conflicto entre las características definitorias opuestas de los elementos presentes en un compuesto, contra la opinión de Freudenthal, habiendo cedido los contrarios extremos a un grado intermedio. La segunda causa de inestabilidad en el escenario de Freudenthal introduce aspectos nuevos para la presente disertación, a saber, la pesadez o levedad intrínseca de los elementos. Estos aspectos se manifiestan por la tendencia, según la visión aristotélica, de la tierra a caer hacia el centro del universo, del fuego a subir hacia los niveles superiores de la región esférica circunscrita por la órbita lunar, y del agua y el aire a moverse a las regiones intermedias. Se dice que la tierra tiene una pesadez absoluta porque cae en los demás medios, mientras que el agua tiene una pesadez relativa porque cae en el fuego y en el aire, mas no en la tierra; el aire también tiene pesadez relativa porque cae en el fuego. De igual manera, el fuego es absolutamente leve, y el aire y el agua relativamente leves (*Cael*, IV, 1, 308a 29 y ss.). [11] La noción de simplicidad de los elementos se introduce en *Del cielo* en relación con estas cualidades inherentes de pesadez y levedad:

> Los cuerpos son, o bien simples, o bien compuestos de éstos, y por cuerpos simples me refiero a aquellos que por naturaleza poseen un principio de movimiento, como el fuego y la tierra y sus especies, y todo lo afín a ellos. Así pues, también los movimientos son necesariamente simples o en cierto modo compuestos —simples en el caso de los cuerpos simples, compuestos en el de los compuestos— y el movimiento va de acuerdo con el elemento prevalente [*Cael*, I, 2, 268b 27-269a 3].

Parece razonable, pues, buscar aquí una tercera relación independiente que gobierna la proporción de constituyentes de un compuesto. Esto concuerda al menos con Freudenthal en la medida en que, al considerar él la levedad y la pesadez como una segunda causa de inestabilidad, las tiene por propiedades irreductibles al calor y la humedad. Y, como ya se dijo en la sección "La teoría aristotélica de la mezcla", si se ha de entender que la estrategia expuesta en *DG*, II, 2 presupone o no presupone tal reducción, no hay allí la menor indicación de cómo concebirla.

En Needham (1996, p. 267) hice la modesta propuesta de que la situación de equilibrio de una cantidad de compuesto a lo largo de una línea radial que terminara en el límite interior de la región supralunar es efecto de la tracción hacia abajo del contenido de tierra y la tracción hacia arriba del contenido de fuego. Aunque lo anterior basta, junto con ecuaciones obtenidas de la relación de los grados intermedios de calor y humedad con las proporciones de las sumas de las cantidades de elementos poseedores de los grados extremos correspondientes, para determinar las proporciones de los elementos, simplifica demasiado lo que dice Aristóteles. ¿Por qué no tener en cuenta la pesadez y la levedad relativas de los otros dos elementos? Esto supondría las complicaciones de considerar el medio en el que descansa el cuerpo para determinar, por ejemplo, si en ello intervienen la

levedad o la pesadez relativas del aire. Pero antes de entrar en estos detalles, toda la propuesta podría considerarse fuera de propósito porque en el último pasaje citado Aristóteles habla de movimiento, no de reposo, y el aspecto observable pertinente debería ser la velocidad de descenso o ascenso, y no la posición. (No hay acuerdo, sin embargo, en cuanto a si la velocidad es de la caída libre [O'Brien, 1995] o de un brazo de una balanza contrapesada [Lewis, 1995].) Además, parece que Aristóteles quiere decir que "el movimiento va de acuerdo con el elemento prevalente" en el sentido de concordar con su *preponderancia*, es decir, la cantidad por la que excede al otro, según las diferencias y no las proporciones entre los constituyentes elementales (Lewis, 1995, p. 94; O'Brien, 1995, p. 69; *cf. Cael*, IV, 4, 311a 30-33). Sin embargo, esta segunda línea de aproximación supone, a su vez, complicaciones considerables. Pero cabe advertir que también implica cierto cambio de los supuestos sobre lo que está en cuestión. La idea de la preponderancia pone en duda la aseveración de Jammer de que el peso, "en el pensamiento antiguo, era […] intensivo y no extensivo" (1997, p. 18). Aristóteles es confuso en este punto. Algunos pasajes indican claramente que las relaciones de mayor pesadez y mayor levedad son nociones intensivas, como cuando dice: "Por más leve o relativamente leve nos referimos a un cuerpo, de dos cuerpos dotados de peso e iguales en volumen, que es superado por el otro en la velocidad de su movimiento descendente natural" (*Cael*, IV, 1, 308a 31 y s.). Una vez más, la referencia a especies de materia combinada sin mención de volumen, como cuando afirma: "De dos cosas pesadas, como la madera y el bronce, decimos que una es relativamente leve y la otra relativamente pesada" (*Cael* IV, 1, 308a 8-9), también hace pensar en nociones intensivas. Pero, sin duda, tenía concepciones extensivas: "Cuanto mayor es la cantidad de aire, tanto más dispuesta está a moverse hacia arriba" (*Cael*, IV, 2, 308b 27).

Cuando se considera la idea de que la preponderancia determina el movimiento, en ello intervienen no sólo las proporciones de los elementos, sino la cantidad de cada uno en determinada porción de compuesto. Esto es más que las tres proporciones independientes requeridas para determinar la composición, y exige más información que el problema original. O'Brien y Lewis no dan solución alguna a ese problema, sino que se limitan a dar por cierta la idea de las proporciones elementales al explicar cómo puede entenderse que la preponderancia de algunos elementos sobre otros da origen a distintas velocidades de descenso o ascenso (Lewis, 1995, pp. 96-97; O'Brien, 1995, p. 69). Para dar una idea de la clase de relación que contemplan sin entrar en sus diferencias de opinión, supongamos que tenemos dos cantidades, π y ρ, de distintas especies de compuesto (por ejemplo, hueso y carne). Si T_π fuese el contenido de tierra de π, A_ρ el contenido de agua de ρ, y así sucesivamente, considérese cómo las diferencias elementales determinarían cuál de los compuestos, π o ρ, caería más rápido en un medio dado, digamos aire. Supongamos que el aire no cae en un medio aéreo, por lo que el contenido de este elemento no tiene importancia. En tal caso, la velocidad de caída de π en el aire sería mayor que la de ρ si

$$(T_\pi + A_\pi - C_\pi) > (T_\rho + A_\rho - C_\rho),$$

es decir, si el exceso neto de los constituyentes más pesados sobre los leves en π es mayor que en ρ. Es evidente que el "si" no puede adquirir fuerza de "si, y sólo si", dado que distintas combinaciones de cantidades constitutivas pueden originar el mismo exceso neto.

Podríamos especular que es posible medir las velocidades de caída sobre la base de que, dado cierto volumen, la tierra pura cae más rápido (si bien mayores volúmenes de tierra pura caen aún más rápido), y una cantidad π (del volumen apropiado) en la que $(T_\pi + A_\pi) = C_\pi$ permanece en reposo en el aire. (Si $[T_\pi + A_\pi] < C_\pi$, π se elevaría en el aire.) Esto nos lleva de nuevo a mi propuesta original, con la modificación de que alcanzar una situación de equilibrio depende tanto del medio como del volumen de la cantidad de sustancia compuesta. En el caso del volumen concreto de sustancia compuesta que flota libremente a cierta altura en el aire, tenemos una tercera ecuación, independiente de aquellas que gobiernan los grados de calor y humedad,[12] suficiente para determinar las proporciones de los elementos constituyentes. Teniendo en cuenta el postulado de Lewis (1995, p. 90) de que las velocidades atañen a diferencias de las cantidades de material en los brazos de una balanza, se podría considerar que la cuantificación de las velocidades de caída da una medida de la cantidad total de materia en distintos volúmenes de la misma sustancia.

Resolver el problema de la composición (proporción de constituyentes) de acuerdo con este modelo supone una buena dosis de especulación, y en consecuencia quizá no ofrezca una solución al problema de interpretar la perspectiva de Aristóteles. No viene, pues, al caso abordar variaciones sobre el tema. Sin embargo, es importante mostrar que se puede encontrar sentido a la noción de proporciones elementales en un compuesto concebido según el modelo aristotélico, por lo menos en principio. Armados con esta noción, podemos retomar aquí la pregunta que dejamos abierta al final de la sección "La teoría aristotélica de la mezcla".

La noción de Aristóteles de la presencia potencial de los elementos parece implicar un aserto en el sentido de que un compuesto puede ser tierra, agua, aire y fuego. El punto no está claro. Pero para simplificar la exposición se ha elegido un ejemplo no aristotélico —aunque apropiado para cualquiera que, como Duhem, se interesa en aplicar las ideas de Aristóteles a un contexto más moderno— en relación con el cual se propondrán los puntos esenciales. El agua se considerará un compuesto de hidrógeno y oxígeno. El aserto inicial es, pues:

El agua es posiblemente hidrógeno y oxígeno.

Esto parecería significar que de cualquier cantidad determinada de agua, digamos π, es cierta una propiedad potencial concreta, como se expresa en:

π es posiblemente hidrógeno y oxígeno.

¿Pero qué exactamente tiene la propiedad de ser posiblemente hidrógeno y oxígeno, y cómo debe entenderse esta proposición formal? Sin duda, no es posible que la totalidad de π sea posiblemente hidrógeno, ni que la totalidad de π sea posiblemente oxígeno. Parece necesario insertar "en parte" en los lugares apropiados. Diríamos entonces:
π es en parte posiblemente hidrógeno y π es en parte posiblemente oxígeno.

Es decir, hay una parte de π, digamos ρ, que es posiblemente hidrógeno, y una parte σ de π que es posiblemente oxígeno, siendo estas partes mutuamente excluyentes y conjuntamente exhaustivas. Esto podría formularse diciendo que en cualquier cantidad determinada, π, de agua,

$$\exists\rho(\rho \subset \pi \wedge \Diamond (\text{hidrógeno}(\rho) \wedge \text{oxígeno}(\pi - \rho))) \tag{1}$$

donde $\subset$ es la relación mereológica de parte propia (excluyendo la posibilidad de identidad) y $\pi - \rho$ es la diferencia mereológica o residuo de π menos ρ: es decir, lo que queda de π cuando se resta ρ. (Esta diferencia se define formalmente como la suma de todas aquellas cantidades que son parte de π, y separadas [sin superposición parcial] de ρ.) $\exists\rho$ es el cuantificador existencial, que se lee "hay una parte ρ tal que…"; $\Diamond$ es el operador modal, que se lee "es posible que…", y $\wedge$ significa "y".

La proposición (1) expresa un sentido en el que los elementos están presentes en potencia en un compuesto. Pero, podría objetarse, cualquier parte propia ρ' de una parte ρ de la que se dice que es posiblemente hidrógeno es en realidad agua, así que alguna parte, ρ'', de ella (ρ') es, por la misma razón, posiblemente oxígeno. Ahora bien, si la totalidad de ρ es posiblemente hidrógeno, en virtud de la homogeneidad se presume que todas y cada una de las partes de ρ también lo son, de manera que la parte ρ'' de nuestra

parte arbitraria ρ no es sólo posiblemente oxígeno, sino también posiblemente hidrógeno. Esto, sin embargo, no indica contradicción, ya que

$$\Diamond\varphi \wedge \Diamond\psi \cdot \supset \Diamond(\varphi \wedge \psi)$$

donde ⊃ denota implicación, es un principio conocidamente inválido para una lógica formal aceptable, de manera que

$$\Diamond \text{ hidrógeno}(\rho'') \wedge \Diamond \text{ oxígeno}(\rho'')$$

no implica

$$\Diamond \text{ (hidrógeno}(\rho'') \wedge \text{oxígeno}(\rho''))$$

(Compárese una cita anterior de Gill según la cual [una cantidad de] tierra es en potencia barro y en potencia madera; esto no implica que la cantidad sea en potencia tanto barro como madera.) Pero como está formulada, la proposición (1) no representa fielmente la homogeneidad del compuesto, la cual requiere la inexistencia de una división definida o única de una cantidad de agua en dos partes, una de las cuales es posiblemente hidrógeno mientras que la otra es posiblemente oxígeno. Como lo expresó Aristóteles, la idea de que un compuesto "está integrado por los elementos, que se conservan en él inalterados, pero con sus partículas yuxtapuestas una a otra", plantea el problema de que "el Fuego y el Agua no se generan ni de cualquiera ni de todas las partes de la carne". Buscaba una explicación que —así como "una esfera podría generarse de *cierta* parte de una porción de cera y una pirámide de *alguna otra* parte, pero era posible que una y otra figura se hubieran generado indistintamente de cualquiera de las partes"— describiera "el modo de generación cuando ambas se generan de cualquiera y de todas las partes de la carne" (*DG*, II, 7, 334a 29 y ss.). Duhem expresa una idea semejante cuando, en el pasaje ya citado más extensamente, habla de un "mixto homogéneo cuya mínima parte contiene los elementos en potencia [y] puede regenerarlos mediante la corrupción apropiada" (1902, p. 182).

La proposición (1) no dice en realidad que haya una partición única de π en lo que es posiblemente hidrógeno y lo que es posiblemente oxígeno; habría que añadir una oración para que no exista semejante partición definida. Pero la proposición (1) es compatible con tal aserto de unicidad y debe por tanto elaborarse con una oración adicional incongruente con el aserto de unicidad y más acorde con la idea aristotélica de que, en cierto sentido, cualquier parte del agua puede ser en parte hidrógeno. Sin embargo, hay una restricción que imponer a esta idea: no existe una partición única, pero cualquier partición particular guarda la misma proporción que cualquier otra. Supongamos que "Misma proporción(π, ρ, σ, τ)" abrevia que la relación de la proporción entre π y ρ es igual que entre σ y τ. Así, para el caso de cualquier cantidad determinada, π, de agua, la proposición (1) puede elaborarse para quedar:

$$\exists\rho \subset \pi\,(\Diamond\,(\text{hidrógeno}(\rho) \wedge \text{oxígeno}(\pi - \rho)) \wedge \forall\sigma \subset \pi\,(\text{misma proporción}(\rho, \pi - \rho, \sigma, \pi - \sigma) \supset \Diamond\,(\text{hidrógeno}(\sigma) \wedge \text{oxígeno}(\pi - \sigma)))) \qquad (2)$$

donde $\forall\sigma$ es el cuantificador universal, que se lee "para el caso de todas las partes σ, …"

Si una bola de plomo grande y una pequeña se funden y se mezclan, y la cantidad resultante se divide en dos bolas, una grande y una pequeña, en la misma proporción de volumen que las originales, no hay manera de saber si la materia de la bola grande resultante es o no es idéntica a la de la original. De igual manera, según la concepción aristotélica de compuesto, ciertas cantidades de hidrógeno y oxígeno pueden combinarse y formar agua que después se reduzca a sus elementos, pero es imposible saber si la materia de la cantidad original de hidrógeno es idéntica (y no sólo de la misma especie) a la de la cantidad resultante.

Sin duda, la teoría aristotélica de las sustancias y de la conversión de unas en otras no está exenta de problemas. De ello no se deduce en absoluto que cualquiera de las opiniones contrarias de la Antigüedad fuera mejor, y es dudoso si deberían considerarse más cercanas a las opiniones modernas. He tratado de presentar las contribuciones de Aristóteles al desarrollo de las ideas en química bajo un cariz más favorable de lo que suele hacerse.[13] Algunos de sus conceptos pueden resumirse como sigue:

1. El problema fundamental de la química es la generación de sustancias nuevas con base en sustancias precursoras mediante reacciones químicas. Aristóteles advirtió que esto suponía explicar cómo los ingredientes iniciales en un proceso de mezcla pueden afectarse entre sí de manera que ocasionan la formación de productos nuevos.

2. ¿Qué es lo que distingue a una sustancia de otra? No está claro que los atomistas tuvieran alguna idea de sustancia; se limitaron a postular la existencia de inmensos números de partículas que presentan en principio variaciones infinitas de tipo más o menos radical, sin principio general alguno de clasificación en especies químicas. Aristóteles consideró un criterio válido la distinción entre materia homogénea y heterogénea: el material homogéneo está constituido por una única sustancia —ya elemento, ya compuesto—, mientras que la materia heterogénea está constituida por una mezcla de dos o más sustancias.

Este principio desde luego se abandonó con el análisis del agua de Lavoisier, que procedía reduciendo vapor, y no tiene sentido considerarlo en una fase determinada con respecto a un compuesto de hidrógeno y oxígeno. Pero la opinión alternativa no se sistematizó hasta el descubrimiento de la regla de las fases, un siglo después.[14] Aunque Aristóteles se haya equivocado en algunos aspectos importantes, la ciencia moderna, lejos de echar por tierra la idea de una relación fundamental entre fase y sustancia, la ha conservado y elaborado.

3. Lo que llamamos cambio de fase implica una discontinuidad. Aristóteles advirtió una discontinuidad en la primera de las dos clases de mezcla que distinguió, y que no son tales que una transite a la otra de manera continua. Antes bien, hay un cambio brusco cuando un cuerpo excede tanto en tamaño a otro que lo aniquila. Aunque se rechaza la teoría aristotélica específica de las fases, debe admitirse que el filósofo se enfrentó con un fenómeno cuya explicación se nos sigue escapando hoy.

4. Parece que se ha abandonado la idea característicamente aristotélica de presencia potencial. Se dijo aquí que suele adoptarse el punto de vista posterior a Lavoisier para considerar que los elementos se conservan en los compuestos. Pero el elemento potencial no se ha descartado por completo. Es evidente que la presencia en acto de elementos en los compuestos no puede confirmarse por las propiedades que los elementos aislados presentan, así que las cantidades de materia caracterizadas por ciertas propiedades que manifiestan en aislamiento deben entenderse como poseedoras de otros aspectos propios de los compuestos; y a la inversa, la materia de los compuestos debe considerarse poseedora potencial de ciertas propiedades en aislamiento. La caracterización que la tabla

periódica hace de los elementos complementa las listas de propiedades que se presentan aisladas con propiedades potenciales que los elementos presentarían si estuvieran combinados en compuestos. De lo contrario, la definición en cuanto a las propiedades reales excluiría lo que normalmente se considera materia de la misma especie elemental en distinto estado de combinación química.

Centrarse en la estructura atómica no elude este aspecto general. La estructura electrónica característica de los átomos aislados, o de los átomos en moléculas del elemento aislado, se altera en los compuestos. La conservación de la estructura nuclear, aunque necesaria, sin duda no basta para explicar la presencia de elementos cuyas características químicas se atribuyen específicamente a propiedades electrónicas. El hecho de que consideraciones de esta índole llevaran a Paneth (1962) a preguntarse si la química moderna ha descartado la concepción aristotélica de elemento es un buen indicio de que la noción no se sostiene ni cae con el concepto continuo de materia.[15]

BIBLIOGRAFÍA

Aristóteles, *The Complete Works of Aristotle*, vol. I, J. Barnes (ed.), Princeton University Press, Princeton, 1984.

———, *On Coming-to-be and Passing-Away*, E. S. Forster (trad.), Loeb Classical Library, vol. III, Heinemann, Londres, 1955.

Aristóteles, *On the Heavens*, W. K. C. Guthrie (trad.), Loeb Classical Library, vol. VI, Heinemann, Londres, 1939.

———, *Meteorologica*, H. D. P. Lee, Loeb Classical Library, Heinemann, Londres, 1952.

Brakel, J. van, "Chemistry as the Science of the Transformation of Substances", *Synthese*, núm. 111, pp. 253-282.

Cartwright, H. M., "Quantities", *Philosophical Review*, núm. 79, pp. 25-42.

Duhem, P., *Le mixte et la combinaison chimique: Essai sur l'évolution d'une idée*, C. Naud, París, 1902 [traducido en P. Needham (trad. y ed.), *Mixture and Chemical Combination, and Related Essays*, Kluwer Academic Press, Dordrecht, 2002].

Freudenthal, G., *Aristotle's Theory of Material Substance: Heat and Pneuma, Form and Soul*, Clarendon Press, Oxford, 1995.

Gill, M. L., *Aristotle on Substance: The Paradox of Unity*, Princeton University Press, Princeton, 1989.

Horne, R. A., "Aristotelian Chemistry", *Chymia*, núm. 11, pp. 21-27.

Jammer, M., *Concepts of Mass in Classical and Modern Physics*, Dover Press, Nueva York, 1997.

Lavoisier, A.-L. de, *Traité élémentaire de chimie*, Cuchet, París, 1789 [traducción de R. Kerr, *Elements of Chemistry in a New Systematic Order, Containing All the Modern Discoveries*, Dover, Nueva York, 1965].

Lewis, E., "Commentary on O'Brien", *Proceedings of the Boston Area Colloquium in Ancient Philosophy*, núm. 11, 1995, pp. 87-98.

———, "The Dogmas of Indivisibility: On the Origins of Ancient Atomism", *Proceedings of the Boston Area Colloquium in Ancient Philosophy*, núm. 14, 1998, pp. 1-21.

Needham, P., "Aristotelian Chemistry: A Prelude to Duhemian Metaphysics", *Studies in History and Philosophy of Science*, núm. 26, 1996, pp. 251-269.

———, "What is Water?", *Analysis*, núm. 60, 2000, pp. 13-21.

———, "Duhem's Theory of Mixture in the Light of the Stoic Challenge to the Aristotelian Conception", *Studies in History and Philosophy of Science*, núm. 33, 2002(a), pp. 685-708.

———, "The Discovery that Water is H_2O", *International Studies in the Philosophy of Science*, núm. 16, 2002(b), pp. 205-226.

O'Brien, D., "Aristotle's Theory of Movement", *Proceedings of the Boston Area Colloquium in Ancient Philosophy*, núm. 11, 1995, pp. 47-86.

Paneth, F. A., "The Epistemological Status of the Chemical Concept of Element" [original, 1931], *The British Journal for the Philosophy of Science*, núm. 13, 1962, pp. 1-14, 144-160.

Roeper, P., "Generalisation of First-Order Logic to Nonatomic Domains", *Journal of Symbolic Logic*, núm. 50, 1985, pp. 815-838.

Sorabji, R., *Matter, Space and Motion: Theories in Antiquity and Their Sequel*, Duckworth, Londres, 1988.

---

[*] Departamento de Filosofía, Universidad de Estocolmo, SE-106 91 Estocolmo, Suecia.

[1] Por desgracia, varios términos comunes a las disertaciones de los filósofos sobre Aristóteles y el lenguaje cotidiano de la química no se usan de la misma manera. La palabra "sustancia" se entiende en todo el capítulo en el sentido de sustancia química. Sin embargo, como estoy obligado a seguir las traducciones de Aristóteles, empleo "combinación" y "compuesto" en el sentido filosófico —denotando una mezcla homogénea, pero sin reconocer distinción alguna entre soluciones y compuestos— para efectos de continuidad con los pasajes citados.

[2] Véase en Needham (2002a) una interpretación del punto de vista de Duhem sobre las mezclas.

[3] Las citas de Aristóteles se toman de la edición de Barnes [en inglés], salvo indicación en contrario. *De la generación y la corrupción* se abrevia *DG; Del cielo, Cael*, y *Meteorología, Meteor*.

[4] Según Lewis (1998, p. 2), atribuir al adjetivo griego el sentido de "indivisible" o "indiviso" depende del contexto y, por tanto, de la interpretación, y no es un aspecto de la palabra en sí.

[5] Véase una disertación al respecto en Needham, 2002a.

[6] Véanse, por ejemplo, Cartwright (1970) y Roeper (1985).

[7] De hecho, podría proponerse que se les asignen dos tiempos a fin de permitir afirmaciones del estilo de "ahora π es más caliente de lo que era ρ". Sin embargo, tales detalles no se tratan aquí.

[8] El traductor al inglés advierte que Aristóteles no suele distinguir entre disolución y fusión (*Meteor* 318, nota a; traducción de Lee).

[9] Por analogía con el "método de mezclas" de la calorimetría.

[10] Incluso Gill —según cuya interpretación Aristóteles dice que los elementos no se conservan en un compuesto (1989, pp. 79, 149, 151, 212) y son recuperables sólo en potencia, antes que mecánicamente separables como el aceite que flota en el agua—, desarrolla en buena medida la misma idea. Los organismos conservan su identidad por medio de un principio activo que neutraliza la inestabilidad inherente a las sustancias compuestas de las que están hechos, de modo muy parecido a como la fuerza estática permite que un pilar sostenga un puente sin sufrir cambio alguno: "Si el alma no estuviera presente para evitar la dispersión, las partes de los cuerpos compuestos se esparcirían según la naturaleza de sus elementos" (1989, p. 212). Sin embargo, la tesis de la inestabilidad inherente a los compuestos es muy desconcertante habida cuenta de la teoría general de la reacción química desarrollada en *De la generación y la corrupción*, según la cual ciertos grados de las cualidades primarias hacen que cuerpos de la misma categoría de tamaño alcancen valores intermedios entre los grados originales. Si ésta no es la descripción de un proceso tendente al equilibrio, ¿qué es? ¿Por qué se dice que grados contrarios de calor y humedad hacen que los ingredientes originales actúen y sean susceptibles de acción, si ahora resulta que no llevan a un estado de equilibrio, sino que hacen falta fuerzas ulteriores para obligar al producto de tal reacción a permanecer en el mismo estado? Un comentarista enfrentado al problema de interpretar todo el corpus aristotélico quizá tendría que reconocer que Aristóteles dice tal cosa; pero en ese caso también podría abordarse la cuestión de la coherencia del todo. La coherencia es amenazada por la causa *extrínseca* de inestabilidad producida por el contacto (Aristóteles no admite el vacío) con otros cuerpos homogéneos de distintas especies, lo que al final debería conducir a la eliminación de todas las diferencias de sustancia y la consecución de un grado intermedio de calor y de humedad en toda la región sublunar: la muerte tibia, empapada del universo. Los organismos representan sólo una pequeña parte del material.

[11] Cabe advertir que la relación inversa a la de ser una cosa más pesada que otra, la de ser menos pesada, no debe identificarse con la de ser más leve. Lo mismo ocurre con la relación inversa a la de ser una cosa más leve que otra.

[12] Y quizá una cuarta, formulada $T_\rho = (A_\rho + C_\rho)$, correspondiente a un volumen distinto que reposa en el agua.

[13] Véase, por ejemplo, Horne (1966).

[14] *Cf*. el tratamiento del asunto en Needham (2000) y (2002b).

[15] La investigación en la que se basa el capítulo fue patrocinada por The Bank of Sweden Tercentenary Foundation.

IV. EL LEGADO DE KANT A LA FILOSOFÍA DE LA QUÍMICA

J. van Brakel[*]

INTRODUCCIÓN

La relación de Kant con la química es ambigua. ¿Hizo contribuciones acuciosas a la química de su tiempo (Carrier, 1990) o fue un diletante (Heinig, 1975)? ¿Revisó su sistema trascendental o metafísico a la luz de la obra de Lavoisier (Dussort, 1956) o su aseveración de que la química no es una ciencia propiamente dicha representa un juicio definitivo? Esta última opinión dejó una honda huella tanto en los científicos como en los filósofos. Apenas se sabe que más adelante en su vida Kant quizá haya cambiado de opinión. Las investigaciones de su *Transición* o *Übergang* —su pensamiento después de haber escrito las tres *Críticas* y los *Principios metafísicos de la ciencia natural*— no despegaron hasta tiempos recientes. En la primera parte de este capítulo mostraré cómo unas cuantas líneas de Kant tuvieron una influencia desproporcionada sobre la manera en que los filósofos y científicos han tendido a ver la situación relativa de la física y la química, y los nexos entre ambas disciplinas. En la segunda parte trataré de encontrar sentido a las opiniones posteriores de Kant sobre la química y cómo se sitúa esto dentro de su filosofía.[1]

LA RECEPCIÓN CONVENCIONAL DE LA OPINIÓN DE KANT SOBRE LA QUÍMICA

Aunque Kant hizo breves comentarios sobre la ciencia en su *Crítica de la razón pura* y en los *Prolegómenos a toda metafísica futura que haya de poder presentarse como ciencia*, sus opiniones más desarrolladas pueden encontrarse en el prefacio de sus *Metaphysische Anfangsgründe der Naturwissenschaft* de 1786 (en adelante *MAdN*).[2] El título de esta última obra ya indica que la ciencia sólo es posible en razón de ciertos principios metafísicos.

El uso que hace Kant del término "ciencia" es un tanto ambiguo; más aún, debemos estar conscientes de la diferencia de uso de términos como "doctrina", "teoría", "ciencia", *Wissenschaft*, "física", "ciencia natural", "historia natural" en tiempos de Kant y en la terminología moderna (igualmente ambigua). Para Kant, la ciencia cae dentro del concepto más incluyente de doctrina (Plaass, 1994, p. 232). La "doctrina de la naturaleza" puede dividirse en "doctrina histórica de la naturaleza" y "ciencia natural" (4, 468). Presumiblemente bajo la "doctrina" (o descripción o historia) de la naturaleza estarían comprendidas la biología, la psicología empírica, la geografía, etcétera.

De acuerdo con Kant, la ciencia natural es "propia" (pura) en la medida en que "trata a su objeto enteramente conforme a principios *a priori*" (4, 468): "[…] sólo aquello cuya certeza es apodíctica puede llamarse ciencia propia". En cambio, la ciencia impropia se nutre de las leyes de la experiencia (simples regularidades, sujetas al escepticismo de Hume); a la ciencia impropia también se le llama "arte sistemático o doctrina experimental" (4, 473). Sin embargo, por "poco desarrollada" que esté una doctrina de la naturaleza, todas se valen de la facultad de juicio y, en este sentido, tienen una orientación fundamental hacia la meta de la ciencia natural propia (4, 469).

La ciencia natural propia es la física. Tiene una parte pura y una aplicada. La parte pura es estrictamente apodíctica (propia en sentido riguroso). La parte aplicada necesita la "asistencia de principios de la experiencia" (4, 469) y es propia en sentido amplio. Un ejemplo de ciencia propia estricta o pura, a diferencia de amplia o aplicada, es la geometría pura y aplicada. La física se basa en principios *a priori*, tanto de las matemáticas como de la filosofía (una metafísica de la naturaleza):[3] "[…] la ciencia natural propia presupone la metafísica de la naturaleza" (4, 469).[4] El uso de las matemáticas introduce la parte pura de la ciencia, y en el mayor nivel de abstracción se encuentra el apriorismo metafísico.

La química se basa únicamente en principios *a posteriori*. Las ciencias como la química son racionales (porque emplean el razonamiento lógico), pero no ciencias *propias*, porque carecen de la base del juicio sintético *a priori*. La química puede ser "un arte sistemático o estudio experimental" (4, 468), pero nunca una ciencia propia, porque los fenómenos químicos no se prestan al tratamiento matemático que los vincularía con el apriorismo: "[…] una doctrina de la naturaleza contendrá sólo tanta ciencia propia como matemática aplicada haya en ella".[5] Quizá la cita más famosa de Kant sobre la química sea la siguiente:[6]

> En la medida, pues, en que no es posible construir un concepto de las acciones químicas recíprocas de la materia; esto es, no se puede enunciar una ley del acercamiento o alejamiento de las partes de las materias, según la cual (por ejemplo, en proporción con sus densidades y cosas semejantes) puedan intuirse y presentarse *a priori* en el espacio sus movimientos y las consecuencias de éstos (exigencia que difícilmente se cumplirá alguna vez), la química no puede llegar a ser más que un arte sistemático o doctrina experimental, pero nunca una ciencia propiamente dicha, porque los principios de la química son meramente empíricos y no admiten presentación *a priori* en la intuición. Por lo mismo, no permiten concebir ni remotamente las leyes fundamentales de los fenómenos químicos, porque son incapaces de aplicar las matemáticas [4, 470-471].

La química ni siquiera es una ciencia teórica aplicada en el sentido en que lo es la geometría usada por un carpintero. La química descansa *únicamente* sobre principios empíricos. En el estado actual de la disciplina, no es posible una ciencia química constituida por principios metafísicos y matemáticos *a priori*. [7] La química adquiriría la condición de ciencia propia sólo si llegara a sus conceptos de objetos determinados mediante la presentación del objeto en la intuición *a priori*.[8] En consecuencia, una ciencia empírica como la química utiliza un método racional de investigación, pero no es una ciencia *propia* o pura; *no* es una *eigentliche Wissenschaft* (ciencia propia). Por lo tanto, "la explicación más completa de ciertos fenómenos por principios químicos siempre deja una estela de insatisfacción, ya que a través de estas leyes contingentes aprendidas por la sola experiencia no pueden aducirse fundamentos *a priori*" (4, 469).

Además, en el pasaje decisivo, Kant dice no sólo que la química no se equipa con una ciencia propia porque no hace uso de las matemáticas, sino que esta exigencia difícilmente se cumplirá *alguna vez*. [9]

En consecuencia, para el Kant "convencional" un requisito de la ciencia "propia" es su vínculo con la metafísica y las matemáticas. La idea de que la ciencia "propia" emplea las matemáticas ha persistido hasta el día de hoy, pero la metafísica se ha abandonado. Para decirlo sin ambages, los positivistas lógicos desecharon la metafísica, la sustituyeron con la lógica y adecuaron ésta a las matemáticas como "fundamento metafísico" de toda ciencia "propia".[10]

Repercusiones de la opinión de Kant de que la química no es una *eigentliche Wissenschaft*

Las primeras opiniones kantianas sobre la ciencia tuvieron una enorme influencia, que se extendió mucho más allá de sus seguidores y del pequeño círculo de especialistas en Kant. En el mundo de habla inglesa, la opinión kantiana de que la química no es una ciencia genuina está "ilustrada por el lugar que ocupa esta disciplina en la *Teología natural* de William Paley, el libro de texto obligatorio leído por todo caballero de Cambridge durante el siglo XIX" (Nye, 1993, p. 5). El químico Meyer (1889, p. 101), en un discurso pronunciado ante la Asociación de Naturalistas y Médicos Alemanes,[11] publicado después en inglés en el *Journal of the American Chemical Society*, dice de paso que la opinión de Kant sobre la química se trató en el *Deutsche Rundschau* de noviembre de 1889. Paneth (1931 [1962, pp. 7-8]) aduce que la definición de Kant da por resultado una concepción muy estrecha e inadecuada de la ciencia, y declara: "[…] la química también [es] una verdadera ciencia, incluso en aquellas ramas en que contiene poca o ninguna matemática".[12] Pero esta oposición ocasional de los químicos a las opiniones de Kant nunca llegó a ser influyente.[13]

Ejemplos más recientes de la influencia omnipresente de la opinión de Kant se encuentran en la filosofía de la naturaleza; por ejemplo, Hartmann (1948) dice que "toda la química semejante a leyes es física pura". En 1949, el físico y filósofo de la ciencia Dingle lo expresó en términos más categóricos:[14] "Lo cierto es que la química no tiene lugar en el esquema científico estricto […] Con justa razón figura de manera prominente en la historia de la ciencia; en la filosofía de la ciencia no debe figurar en absoluto".

En tiempos aún más recientes, en 1994, el químico cuántico Bader, haciéndose eco de Kant pero agregando expresamente una concepción reduccionista, escribió:[15] "Una disciplina científica comienza con la clasificación empírica de las observaciones. Se vuelve exacta, en el sentido de que las predicciones son posibles, tan pronto como la clasificación representa la física que subyace a una observación". Y en una conferencia de filosofía de la química, en 1996,[16] el químico teórico Frenking (1998, pp. 106-107), al abordar la autonomía de la química, afirma: "La química se revolucionaría en 1927, una vez descubierto el enlace, la base misma de todos los fenómenos químicos. La química como ciencia verdadera sigue en proceso de desarrollo porque la investigación química cuántica de los muchos fenómenos químicos aún está en pañales".

Aunque no se refiere a Kant, parece más que admisible que su "ciencia verdadera" descienda de la *eigentliche Wissenschaft* kantiana. De manera similar, Arabatzis (1998, p. 155) propone que el conflicto entre físicos y químicos en torno al electrón "se resolvió a satisfacción" con "el advenimiento del principio de exclusión, el espín y, finalmente, la mecánica cuántica". Ante el avance de la química cuántica, según la cual la química sería enteramente reductible a la física, la química por fin habría alcanzado la condición de ciencia propiamente dicha. Por último, Mainzer sostiene (en la misma conferencia) que la química ha llegado a ser una *ciencia* en el sentido de Kant, porque usa cada vez más las matemáticas: "La química participa en una *red* cada vez mayor y más compleja *de*

metodologías matemáticas y tecnologías asistidas por computadora. Así, la química es una *ciencia* en el sentido de Kant, pero con fronteras cambiantes" (Mainzer, 1998, p. 49; las cursivas son del original).

Desde el advenimiento de la mecánica cuántica, encima de la aseveración kantiana de que "la química no es una *eigentliche Wissenschaft"*, se ha usado una referencia obligada a la autoridad de Dirac para justificar la reducción de la química a la física, es decir, a las matemáticas propias de la mecánica cuántica.[17] Dirac (1929) dijo: "Las leyes subyacentes necesarias para la teoría matemática de gran parte de la física y la totalidad de la química se conocen, pues, perfectamente, y la única dificultad estriba en que las aplicaciones exactas de estas leyes llevan a ecuaciones demasiado complicadas para ser solubles".

Lo anterior podría considerarse la culminación de la opinión de Kant en el siglo XX.[18] Como la opinión de Kant, el comentario de Dirac se menciona en conferencias dirigidas a un público general de científicos dando a entender que todo el mundo lo conoce. Por lo regular la mención es acrítica; por ejemplo, la que hace el Premio Nobel Mulliken en *Physics Today* (1968),[19] y sólo en raras ocasiones la alusión a Dirac es más crítica.[20] La opinión de Dirac correspondía a "los tiempos" porque el positivismo lógico no sólo sustituía la metafísica con la lógica, sino que insistía en la unidad de la ciencia: todas las ciencias habrían de reducirse a la física.

En el prefacio de los *MAdN*, Kant también dice que la psicología está aún más lejos que la química de la ciencia propiamente dicha.[21] No es posible una ciencia psicológica experimental al menos. En consecuencia, la psicología no puede ser siquiera una "ciencia impropia". Los pasajes pertinentes son difíciles de interpretar, y hay algunas ambigüedades si se comparan con textos anteriores de Kant. En el siglo XIX esto dio lugar a extensos debates entre los intérpretes. Algunos estudiosos llegaron al extremo de decir que el frecuentemente citado pasaje donde se degrada a la psicología como ciencia posible es un descuido inconsecuente con el resto de los escritos de Kant (Drews, 1894, p. 259). En cambio, se planteó que la psicología de hecho podría situarse mejor que la química como "ciencia propia": Kant elaboró la distinción entre "naturaleza corpórea" *(res extensa*) y "naturaleza pensante" *(res cogitans*). En sus conferencias de metafísica de 1765-1766 describió a la psicología como la "ciencia empírica metafísica de las personas",[22] y usó la expresión *mathesis intensorum*, dando a entender que aunque no fuese el caso en ese momento, la psicología podía llegar a ser una ciencia propia. No obstante, esto se refiere a los años "precríticos" de Kant y por lo mismo no atañe a la cuestión de la ciencia propia como se trata en los *MAdN*.

Por otra parte, los posteriores comentarios negativos de Kant en cuanto a que la psicología pudiera llegar a ser una ciencia se refieren a un tipo particular de psicología, esto es, la que se basa en la introspección.[23] Ésta no es ciencia de ningún modo; ni siquiera impropia. Por el contrario, los escritos y conferencias de Kant sobre antropología contienen mucho de lo que hoy podría llamarse psicología, y para Kant la antropología es una ciencia empírica respetable.[24] Además, el *mathesis intensorum* siguió siendo de importancia decisiva para Kant en su periodo crítico.[25] Se puede encontrar en Kant una prefiguración de la psicofísica, que cuantifica y matematiza la percepción; tal es el *mathesis intensorum.[26]* Así pues, lo que hoy se llama psicofísica podría incluso llegar a ser una ciencia propia. Sin embargo, Kant no consideró esta parte de la psicología.[27]

Examinando en retrospectiva toda la trayectoria filosófica de Kant, Lequan (2000, p. 5) ha propuesto que la química cumple para él una doble función: por un lado, es parte de la física o ciencia natural; por el otro, sirve de analogía, metáfora o paradigma del método de la filosofía crítica.[28] Aunque en el periodo precrítico la química desempeña un papel más bien marginal, en la obra posterior se reivindica. El creciente interés de Kant por la química puede advertirse a partir de 1780, y hacia el final de su vida el filósofo le da un lugar cada vez más prominente. En 1786 la química era todavía un simple arte empírico, un "modelo opuesto" a lo que debe ser la ciencia propia. Sin embargo, en las *Reflexiones sobre la física y la química*, [29] de fines de los años noventa del siglo XVIII, y en el *Opus postumum*, [30] del mismo periodo, su interés por la obra de químicos contemporáneos ocupó el primer plano y se volvió parte integral de su proyecto filosófico.[31]

Al principio, la doble función de la química planteó a Kant una especie de paradoja. Por un lado, como parte de la ciencia natural, la química no era una ciencia propia (porque era "meramente" empírica); por el otro, la química representa un paradigma del método de la filosofía crítica (por ejemplo, los métodos de análisis, separación, purificación y síntesis son comunes a la química y la filosofía).[32] Quizá ni la filosofía ni la química puedan matematizarse, pero tienen algo más: su método constructivo. La química en cuanto ciencia o arte *práctica* se asemeja más a la ciencia moral que a la física. Por ejemplo, Kant dice que "un procedimiento parecido a la química" es un procedimiento necesario en el análisis del sentido común moral: lo que Körner (1991) designó "el método cuasiquímico".[33]

Por otra parte, la química plantea a la filosofía de la naturaleza nuevos problemas, "desconocidos para la física matemática", esto es, dar una explicación de la variedad de sustancias. Incapaz de hacer una descripción filosófica de esta variedad, Kant empezó a ver una laguna en su sistema filosófico.[34] Una causa importante de la "laguna" que Kant advirtió en su filosofía en la edad madura es que, si el juicio sintético *a priori* tiene que garantizar la posibilidad de toda experiencia, falta mucho si se está empantanado en la sola física (es decir, la mecánica newtoniana). Como ya lo dice en sus conferencias de física de 1785, la *Danziger Physik*:[35]

> La química se ha elevado a una mayor perfección en tiempos recientes; también merece con plena legitimidad el derecho sobre toda la doctrina natural; porque sólo el menor número de manifestaciones de la naturaleza pueden explicarse matemáticamente: apenas la mínima parte de los sucesos naturales tienen demostración matemática. Así, por ejemplo, sin duda puede explicarse conforme a proposiciones matemáticas que la nieve caiga a la tierra; pero por qué los vapores se transforman en gotas o pueden disiparse, aquí las matemáticas no aportan esclarecimiento alguno, sino que esto debe explicarse por las leyes empíricas universales de la química […]

Esta "laguna" conduce al proyecto de *Übergang* o *Transición* de Kant (véase más adelante).

Si se toma en serio la atención que Kant dedicó toda su vida a la química, los pasajes más antiguos pueden leerse con un enfoque menos desdeñoso. Desechar el pasaje del prefacio de la segunda edición de la *Crítica de la razón pura* de 1787, donde Kant menciona a Stahl, Toricelli y Galileo, por considerar que se refiere "simplemente" a la ciencia empírica "impropia" pondría un acento equivocado. Para Kant, estos científicos son exponentes de la "revolución copernicana" de plantear activamente preguntas a la naturaleza, y elogiaba en particular a Stahl por idear experimentos para responder preguntas teóricamente significativas.[36]

Lo primero que conviene señalar es que Kant no tiene un fin reductivo. Su opinión no es que para ser "una ciencia propia" la química deba ser reductible a la física matemática. El problema que tratamos se sitúa entre dos particiones triples. Por un lado, para ser una ciencia propia, los principios matemáticos, metafísicos y específicos de la ciencia deben ser claramente separables (dejarse en su ámbito propio); por el otro, deben establecerse sus relaciones. En el marco de este esquema tripartito, hay tres posibles perspectivas para la química, de acuerdo con la reconstrucción de Lequan (2000):

i) llegar a ser una ciencia propia en sentido estricto, constituida por principios puramente filosóficos, esto es, completamente *a priori;*

ii) llegar a ser una ciencia propia en sentido amplio (integrada por una parte pura y una aplicada);

iii) seguir siendo una ciencia impropia, esto es, sistemática y racional, pero meramente experimental o descriptiva en el sentido de aportar generalizaciones experimentales, no leyes naturales necesarias.

Aquí, "ciencia impropia" no deja de ser ciencia: es sistemática, puede hacer uso de las matemáticas, pero depende enteramente de generalizaciones empíricas, que deben distinguirse de una *mera* descripción (que puede ser un "arte" guiado por el juicio reflexivo, pero sin muchas "causas y consecuencias" en el sentido metafísico, y sin posibilidad de utilizar herramientas matemáticas).

Bien mirado, parece que Kant se inclinaría por la opción intermedia tanto para la química como para la física (en el sentido moderno de estos términos). Para que la química adquiera la condición de ciencia propia en sentido amplio, deben encontrarse las leyes de formulación matemática que rigen las afinidades entre las sustancias,[37] y las leyes universales de atracción y repulsión entre las sustancias (Lequan, 2000, p. 19),[38] para lo cual es necesario encontrar las "cantidades simples" y las magnitudes extensivas e intensivas pertinentes. Un signo de la imperfección de la química es que no puede definir apropiadamente su objeto de estudio: no tiene una imagen metafísica clara de aquello que posibilita la variedad de sustancias.[39] Para alcanzar la categoría de ciencia propia en sentido amplio, la química debe no sólo hacer uso de las matemáticas, sino resolver la cuestión metafísica de la posibilidad de conocimiento *a priori* en relación con la

diversidad de sustancias.

Aunque la química sólo puede adquirir la condición de ciencia propia en sentido amplio, tiene otras características que le dan un alto rango para Kant. Ya he esbozado esto al mencionar las analogías que Kant ve entre los métodos de la química y los de la filosofía.[40] Se puede especular que, si la química hubiera de elevarse al rango de ciencia propia en sentido amplio, aun así tendría una función doble o incluso dialéctica. Por una parte, a través de su relación con el apriorismo matemático y con la metafísica de explicar *a priori* la variedad de sustancias mediante el lado trascendental de su teoría dinámica de la materia (véase más adelante), se convertiría en parte de la física en el sentido de ciencia natural propia (con una parte pura y una aplicada). Por la otra, mantendría (o hasta fortalecería) su posición en el proceso de llegar a ser un modelo analógico de toda investigación no "dominada" por las matemáticas, lo que le daría una función unificadora, tema después desarrollado por Hegel.

En consecuencia, no debe interpretarse que los conocidos pasajes del prefacio de los *MAdN* excluyen la posibilidad de que la química llegue a ser algún día una ciencia propia. Si pudiera formularse una ley universal de la "afinidad" capaz de explicar *a priori* la atracción y repulsión entre las sustancias, esto es, las distancias relativas entre las partes de la materia, entonces la química se volvería una ciencia propia.[41] Aunque esta ley no pudiera dar un procedimiento *a priori* para calcular las densidades de todos los materiales, debería poder al menos describir en principio todas las reacciones químicas posibles.

Al final de su vida, Kant llegó a advertir que algo faltaba en su sistema. Entre los años de 1796 y 1803, trabajó en la elaboración del borrador de una obra que había titulado *Transición de los principios metafísicos de la ciencia natural a la física*. [42] Suele dársele el nombre de *Opus postumum* (en adelante *Op*), aunque entre los cientos de páginas de texto hay a lo sumo el borrador de un capítulo; el resto son "notas de trabajo".

Durante mucho tiempo se dio por sentado que Kant no fue capaz de ninguna filosofía seria en la edad avanzada. De manera característica, Adickes, encargado de editar la *Akademie Ausgabe*, dice que en los años noventa del siglo XVIII Kant no habría podido dar un seguimiento serio a la literatura química.[43] El *Op* apareció en alemán (en la edición de la Academia de Ciencias de Berlín) después de más de un siglo de problemas que retrasaron su publicación. Y lo que se publicó suele considerarse un galimatías: textos desordenados, sin cuidado editorial alguno.[44] La primera edición abreviada en inglés apareció en 1993.[45] Sin embargo, hoy es general la opinión de que el proyecto de la *Transición* de Kant debe tomarse en serio.

Por su correspondencia con Kiesewetter[46] sabemos que Kant ya pensaba en su nuevo proyecto antes de 1795, y quizá desde 1790, pero no lo empezaría hasta 1796, y de manera más intensa de 1797 en adelante. Los amigos que lo visitaban atestiguan la importancia que el proyecto tenía para Kant. Al relatar este episodio, Marty (1986, VI) usa la expresión "obra maestra" para subrayar la importancia del proyecto, con cuya ejecución la vejez de Kant no empezó a interferir seriamente hasta 1800.

Kant se había convencido de que se debía añadir una nueva ciencia *a priori* a sus *MAdN* de 1786. Sin esta nueva ciencia *a priori*, la "doctrina pura de la naturaleza" queda incompleta.[47] En una carta a Garver, el filósofo dice:[48] "El proyecto en el que trabajo ahora se refiere a la 'Transición de los principios metafísicos de la ciencia natural a la física'. Debe completarse, porque si no, quedará una laguna en la filosofía crítica" (1798, 12, 257). Y en el *Op*:

> Estos dos territorios (la metafísica de la naturaleza y la física) no se tocan de manera inmediata, por lo que para ir del uno al otro no basta con dar un paso. Antes bien, existe un golfo entre ellos, sobre el cual la filosofía debe construir un puente para alcanzar la orilla opuesta, porque, a fin de que los fundamentos metafísicos se combinen con los [fundamentos] físicos [que tienen principios heterogéneos], se requieren conceptos intermediarios, que participen de ambos [1798, 21, 475].

Aquí Kant vuelve a su famosa afirmación de la *Crítica del juicio* (1790), en cuyo prefacio dice: "[…] con esta obra doy por terminada toda mi empresa crítica" (5, 170). La realidad (el mundo de la experiencia) está determinada sólo en parte por la mecánica newtoniana. El mundo de las sustancias y sus propiedades permanece incomprendido; la variedad de sustancias (tal como se manifiesta en sus propiedades) queda totalmente sin explicación (con respecto a una metafísica de la naturaleza). Por ejemplo, el concepto de oro abarca un número indefinido de propiedades que sólo la experiencia puede revelar;

pero éstas también pertenecen a la naturaleza. ¿Cómo, entonces, puede encapsularse categóricamente todo el mundo de la experiencia? Ésa es la principal pregunta del *Op*, según Heyse (1927), y las interpretaciones más recientes pueden considerarse variaciones sobre el mismo tema. El problema más concreto de Kant era cómo relacionar la diversidad de sustancias con el concepto metafísico de materia. Los *MAdN* ofrecían sólo un análisis de la "materia en general", y no la "doctrina de cuerpo" (que incluiría la densidad de los cuerpos) que afirmaban y se proponían.

En el siglo XVIII había dos teorías rivales de la materia: el concepto corpuscular y el dinámico. El primero era una forma de atomismo: todos los objetos físicos están compuestos de partes discretas y diminutas que se encuentran distribuidas en el vacío. De acuerdo con el concepto dinámico, que Kant sostuvo y desarrolló, las sustancias están constituidas por la interacción de fuerzas en movimiento. La sustancia es definible en relación con las fuerzas móviles de la atracción y la repulsión. La conocida distinción entre propiedades primarias y secundarias no existe en la explicación dinámica de la materia: *todas* las propiedades de la materia pueden entenderse en cuanto a la atracción y la repulsión. No hay propiedades primarias corpusculares. Todas las propiedades "kantianas" son relacionales e igualmente manifestaciones de la actividad de aquellas fuerzas fundamentales que presentan la realidad material al sujeto cognoscente (Edwards, 2000, p. 110). En el *Op*, mediante el uso del concepto de éter (véase más adelante), el concepto de continuo (o *plenum*) universal de fuerzas materiales se vuelve el aspecto central de la teoría dinámica de la materia de Kant. La química puede transformarse en ciencia propia (en sentido amplio) sólo fundamentándose en esta teoría dinámica de la materia, que da la posibilidad de matematizar las cualidades "secundarias". Centradas en estas fuerzas dinámicas fundamentales en el *Op*, la física y la química a menudo parecen fusionarse para Kant (más o menos como ocurre en la moderna fisicoquímica).[49]

Kant disiente de la "ridícula" solución de los atomistas de presuponer un tipo primordial de materia homogénea y reducir las diferencias cualitativas entre las sustancias a diferencias de cantidad. Argumenta explícitamente contra las explicaciones de diferencias de densidad acordes con los modelos atomistas. Tanto los atomistas como la invocación a las mónadas metafísicas reducen la materia a puntos matemáticos, lo que niega la gran variedad de sustancias.[50] Kant dice que el químico se equivoca si piensa que a través del análisis se pueden obtener elementos que sean "absolutamente simples".[51] Kant es partidario de una tesis del *continuum* (al menos como idea reguladora). Su teoría de la materia es dinamista, plenista e integradora del *continuum*, y guarda un marcado contraste con la de Boyle y Newton.[52]

Westphal (1995, p. 403) ha argumentado de manera convincente que el problema central que los *MAdN* dejaron al *Op* fue explicar cómo podían diferir en densidad volúmenes iguales de distintas materias básicas. La densidad es central en el problema de Kant.[53] La omisión de la teoría dinámica de la materia de Kant en los *MAdN* radica en no dar una explicación adecuada de la densidad, ni de nociones relacionadas como cohesión, rigidez y fricción.[54] Además de la densidad, debe explicarse, en particular, la cohesión, al menos para dar sentido a la forma y función de las balanzas. Sólo la primera

parte de los *MAdN*, la “Foronomía”, sale ilesa en el *Op*. [55] En éste, Kant aspira a una nueva “dinámica trascendental”. Las “fuerzas motrices” de Kant se encuentran en la base de todo cuanto sucede, incluido el modo en que la materia impresiona nuestros órganos sensoriales. Esto también conduce a una nueva teoría de la “autopostulación” (Förster, 1989). Sólo podemos ver los objetos si antes nos identificamos a nosotros mismos como seres, que son centros de fuerza activa. De ahí que nos percibamos a nosotros mismos y percibamos los objetos a través de nuestra interacción dinámica.

La relación de los *MAdN* con el *Op* ha sido objeto de extensos trabajos académicos, que hasta el momento no han producido unanimidad.[56] Quizá la opción más sensata sea considerar al *Op* no tan distinto de las obras anteriores en contenido, pero sí por cuanto representa un cambio de perspectiva. La “laguna” de la que habla Kant es la necesidad de hacer una descripción unificada de todas las disciplinas sistemáticas. El filósofo ha abandonado la preocupación particular de si tal o cual ciencia es o no propia; aunque no lo sea, tiene que quedar incluida de algún modo. Por otra parte, en la obra tardía de Kant se priva a las matemáticas del lugar que ocupaban como modelo para la metafísica y se les relega a un simple papel auxiliar.[57] El ámbito de la ciencia ha de identificarse “tópicamente”; la finalidad es no producir leyes empíricas por simple reflexión. El problema “científico” de cómo explicar la “cohesión” de los cuerpos (en diferentes estados de agregación)[58] resulta tan central para Kant porque constituye el eje del modo de explicar la “cohesión” del conocimiento sistemático.[59]

En consecuencia, la *Übergang* está concebida para llenar la laguna de la estructura de la ciencia de la naturaleza *(Naturlehre*) de Kant y completar así el plan arquitectónico de su filosofía trascendental. La transición del principio metafísico a la parte empírica de la física y la química depende por entero de la formulación sistemática de una teoría dinámica de la materia. Habrá quienes aleguen que aquí está en juego algo más, es decir, que no se trata tanto de llenar una laguna como de reconstruir totalmente las condiciones de nuestra experiencia de los objetos *en general*.

SOBRE EL ÉTER CALÓRICO Y LA VARIEDAD DE SUSTANCIAS

La "laguna" de la filosofía de la naturaleza de Kant tiene que cerrarse con una teoría dinámica de la materia, lo que conduce al papel central de un "éter del mundo" o "éter calórico".[60] El éter es un *continuum* universal de fuerzas dinámicas (atracción y repulsión) de la materia, y la base material para la interacción entre todas las entidades corpóreas empíricamente observables. Además, es el vehículo de todos los fenómenos de calor y luz. La teoría dinámica de la materia de Kant es la condición previa necesaria de toda experiencia. Por tanto, el concepto de materia es tanto empírico como *a priori* (21, 289), y lo mismo ocurre con los conceptos de calórico *(Wärmestoff*) y éter. Usaré los términos "calórico" y "éter" indistintamente,[61] como Kant lo hace casi siempre en el *Op*.[62]

En los *MAdN*, el calórico etéreo no es más que una sustancia hipotética, pero en el *Op* se eleva al rango de filosofía trascendental.[63] Podría considerarse que los *MAdN* dan una explicación del "Uno", es decir, la materia *per se*, mientras que el éter del *Op* proporciona la base para la multiplicidad y la heterogeneidad de la materia.[64] Kant considera que el espacio no está ni vacío ni homogéneamente lleno, sino lleno de éter calórico en grados variables, y es partidario de explicar la diversidad de sustancias por una distribución variable del éter en el espacio y por la variación cualitativa de la combinación de las fuerzas dinámicas originales.

El éter o calórico es una especie de elemento fluido primordial. Es un fluido elástico que llena el universo. Tiene características tanto de materia como de onda. Es la causa de la diferencia entre el calor y el frío, y explica, desde el origen del universo, la rarefacción y la condensación (concentración) de la materia. Es "la fluidez misma", la condición de toda fluidez. El "estado de agregación" fundamental es el éter fluido; la solidez se deriva de él. Constituye todas las sustancias químicas y las envuelve. Es la matriz de todos los cuerpos. Es la "madre de toda la materia", de la que todos los cuerpos derivan su cohesión.[65] La "proporción interna" del éter (en interacción con las fuerzas motrices) determina no sólo el "tipo" químico, sino el estado de agregación (sólido, líquido, vapor). Kant no hace mayor distinción entre "mezcla" física y química; de hecho, su modelo de reacción química es muy similar al modelo de los "mixtos" homogéneos de Aristóteles.[66] La única diferencia es la (ir)reversibilidad. En una reacción química hay una penetración recíproca completa, posible gracias a la divisibilidad infinita, que da por resultado una combinación homogénea. Una reacción química ocurre si las fuerzas atractivas de la afinidad química superan la atracción cohesionadora.

De manera similar, el calórico se concibe como sustancia expansiva, dotada de intensas fuerzas repulsivas y penetrantes. Cuando el calórico permea cuerpos materiales, sus vibraciones mezclan las partes de éstos. La noción de Kant del calórico etéreo puede verse, en retrospectiva, como aspectos combinatorios de la teoría calórica y la teoría cinética del calor de Lavoisier. Las propiedades del *Wärmestoff* (o *Äther*) determinan las propiedades sensibles de la materia.[67]

Existe sólo una materia "genérica" (no materia*s*), cuyos elementos son cualitativamente distintos. La teoría dinámica de la materia de Kant supone que esta noción de elemento (químico) es cualitativa (no cuantitativa como en las teorías atomistas).[68] El más importante de los problemas es cómo avanzar del concepto general de materia a un conocimiento *a priori* de la variedad de sustancias químicas (como nitrógeno, carbono, oxígeno, hidrógeno: [22, 360]) y sus distintas densidades (por ejemplo, la del agua y la del mercurio). Para entender las diferencias entre sustancias, Kant agrega a la hipótesis dinámica de dos fuerzas motrices la hipótesis del éter.

La materia en general es posible por el vínculo indisoluble entre la atracción y la repulsión. La proporción de estas fuerzas puede variar, lo que presupone la posibilidad de una variedad infinita de sustancias químicas. De ahí que las "primeras causas" no sean dinámicas (como en las teorías atomistas), sino fisicodinámicas.[69] La interacción entre el omnipresente éter y las dos fuerzas originarias crea las diferencias específicas entre los "tipos" de materia. Cada sustancia química se caracteriza por una cantidad de éter y tres fuerzas (fuerza atractiva universal, fuerza repulsiva "propia" y fuerza atractiva "propia" [cohesión química]). Por tanto, el éter es el origen último de la diversidad de sustancias (junto con las dos fuerzas motrices).

Kant distingue cuatro "elementos", aunque éstos son muy distintos de los elementos aristotélicos.[70] Representan más bien clases de reacciones químicas. El éter o calórico es una "quinta esencia" (que remplaza al flogisto como "misteriosa" quinta esencia).[71] El éter calórico es un *stuff* categóricamente dado *a priori*, que es el fundamento de la diversidad de sustancias y sus propiedades. Implica, por ejemplo, que la afirmación de que toda la materia puede pesarse no es una observación empírica, ni un aserto analítico referente al concepto de materia. Expresa la condición que debe presuponerse para posibilitar la experiencia de "cantidad de materia".[72]

El éter cumple varias funciones para Kant.[73] Es necesario porque posibilita toda cuantificación de la materia, en particular el pesaje de cuerpos en una balanza.[74] Además, tiene no sólo significación cosmológica, sino condición de elemento (químico) "especial". Desde el punto de vista cosmológico, la química es superior a las otras ciencias naturales, porque la cosmología necesita la noción de éter.[75] El éter proporciona la base "causal", independiente del sujeto, para la percepción de todos y cada uno de los objetos externos. Es necesariamente real a fin de explicar los fenómenos, o sea, es una condición necesaria para toda experiencia. Cumple la función del concepto intermediario que Kant busca para "llenar la laguna". En cuanto condición necesaria, no puede identificarse por medios empíricos.[76] Desde el punto de vista empírico el éter es una "hipótesis pura" (su existencia es problemática), pero desde la perspectiva trascendental es un postulado de razón puramente especulativa (su existencia es necesaria). Es un dado categórico, que por lo mismo requiere una nueva "deducción" de las categorías (Lehmann, 1963). Si Kant acertó o no en "demostrar" realmente su "solución" de cerrar la "laguna", es una pregunta abierta.[77]

En 1786 Kant todavía parece dudar entre si la química es sólo un arte o una ciencia impropia, pero tiende a preferir lo segundo y espera más en el futuro a causa del doble papel de la disciplina (la analogía entre el arte de la química y la filosofía). En el prefacio de 1786 a los *MAdN*, Kant niega el rango de ciencia propia a la química, pero esto ha cambiado en las posteriores *Reflexiones sobre la física y la química* y el *Op*.

Friedman (1992) atribuye la *Transición* de Kant de los *MAdN* al *Op* principalmente a la influencia de la "nueva química" de Lavoisier. Demuestra que en 1785 Kant ya estaba enterado de los nuevos descubrimientos en química neumática; entre 1785 y 1790 había asimilado los avances en la ciencia del calor, y entre 1790 y 1795 terminó de convencerse del sistema químico de Lavoisier.[78] Las *Reflexiones sobre la física y la química* de fines de los años ochenta y principios de los noventa del siglo XVIII mencionan la teoría de la combustión de Lavoisier, que refutaba la del flogisto. Hacia 1790 Kant asoció la teoría calórica de los gases con el problema de la solidez y el concepto del calor latente.[79] En sus *Lecciones de metafísica (Metaphysik Dohna)*, Kant asocia la ciencia de la química con la doctrina de Lavoisier de la composición del agua.[80] En 1795 (luego de algunas etapas intermedias), Kant reconoce como "hipótesis muy admisible" que el agua esté constituida por hidrógeno y oxígeno.[81] Además, alrededor de 1795 Kant desarrolla una versión propia de la teoría calórica de los estados de agregación.[82] En el prefacio de 1797 a la *Doctrina del derecho*, Kant hace que Lavoisier "represente" a la química (en lugar de Stahl).[83]

Se puede inferir, por tanto, que de 1795 en adelante, bajo la influencia de la obra de Lavoisier, Kant considera que la química ha alcanzado el estatus de ciencia propia (en sentido amplio). Sin embargo, el cambio fue lento y a Stahl no se le descartó sin más: había preparado el camino, porque intentó usar principios *a priori* para "ordenar" la química. También la transición de Kant del flogisto a la oxidación fue lenta; parece que durante algún tiempo usó "oxidación" y "deflogistización" como sinónimos.

Según Schulze (1994, nota 40), Friedman pasa por alto que el *Op* no es sólo una revisión de la teoría de la materia de Kant a la luz de los nuevos adelantos científicos, sino una revisión de aspectos fundamentales de toda su filosofía. Argumenta (1994, p. 105 y *passim*) que el *Op* es una extensión de la metafísica de la naturaleza de Kant, en la que explícitamente hace un espacio para una filosofía de la naturaleza, intermedia entre la metafísica y la ciencia empírica, proporcionando en particular "conceptos intermediarios" (como el de éter calórico) para vincular lo "puramente" *a priori* con lo "puramente" empírico.[84] También Edwards (2000) acusa a Friedman (1992) de serios errores de lectura e interpretación del *Op*,[85] al igual que Westphal (1995, pp. 412-413). Este último critica la afirmación de Friedman de que el motivo de Kant era integrar la química y la teoría del calor con la física matemática, porque Friedman no hace frente a la pregunta de por qué Kant en 1798 "rechazó el modelo matemático". Tampoco explica por qué Kant "se centra en la física y formula repetidas veces su proyecto como una transición a la *física* […]; aborda ampliamente esta […] transición a la física sin

mencionar la química ni la biología […] La física no debería subrayarse con tanta frecuencia ni de manera tan central […] si el problema de Kant consistía tan sólo en relacionar la física con las otras ciencias físicas nuevas". Creo que los críticos de Friedman están en lo correcto cuando argumentan que Kant estaba profundamente insatisfecho con los *MAdN* (o incluso con toda su filosofía crítica), pero los otros desacuerdos se resuelven fácilmente. Kant a menudo usa el término "física" en un sentido que incluye todas las "ciencias físicas nuevas" (expresión de Westphal). La opinión de Kant sobre las matemáticas como modelo "ideal" cambió, porque se dio cuenta de que no podría explicar la experiencia de la variedad de sustancia con base en una metafísica modelada conforme a las matemáticas: de ahí su "pacto" tripartito entre filosofía, matemáticas y ciencia natural.

Sin entrar en la batalla exegética y reconociendo que el círculo hermenéutico nunca está cerrado, en defensa de Friedman puede decirse, como Dussort (1956) ya lo había señalado (véase, también, Lequan, 2000), que en los textos "caóticos" del *Op* hay muchas cosas que respaldan una lectura sesgada hacia la "química", esto es, tomando como centro de atención la "laguna" de no poder relacionar la variedad de sustancias (y sus propiedades fenoménicas) con el *a priori*, y considerando la obra de Lavoisier como una clave para cerrar la laguna. En primer lugar, en ninguna parte del *Op* hay referencia alguna al flogisto. Por otra parte, la noción de calórico se presenta casi en cada página. Aunque Lavoisier no inventó el término "calórico", sin duda lo volvió respetable. En segundo lugar, el éter calórico empieza a asumir el papel de objeto trascendental, en lo cual coinciden la mayoría de los intérpretes. En tercer lugar, Kant usa explícitamente el término "física" en un sentido que incluye la química.[86] Cabe considerar también la constante preocupación de Kant con el uso de la operación de la balanza para pesar, que es pertinente por varias razones.[87] Además, la exposición de Lavoisier del pesaje y sus explicaciones de los estados de agregación son similares a las de Kant. Por último, Dussort señala semejanzas entre las opiniones filosóficas de Lavoisier y las de Kant, en particular el supuesto esencial para Kant de que la sensación (experiencia) debe basarse en el movimiento de la materia.[88]

Parece que no hay duda de que Kant se mantuvo muy pendiente de los adelantos de la química de su tiempo (dejamos de lado la pregunta de si hizo alguna contribución valiosa a ella). En 1804 apareció un obituario de Kant en el *Neues allgemeines Journal der Chemie*, en el que el director de este periódico elogiaba el amplio conocimiento que el filósofo tenía de la química y la atención que le había dedicado. Tampoco hay duda de que Kant (en la edad madura) fue el primero en dar a la química un lugar central en la filosofía. Continuadores de esta tarea fueron Schelling y Hegel.[89] Aunque este avance de la filosofía natural ha sido de poca importancia para la filosofía de la ciencia del siglo XX, al menos aquellos filósofos dedicaron a la química una consideración seria. No siempre puede decirse lo mismo de quienes citaron la tristemente célebre aseveración de Kant de que la química no es una *eigentliche Wissenschaft*.

Dada la opinión predominante en los últimos siglos sobre la relación entre la química y la física, muy estimulada por el comentario de Kant de que la química *no* es una *eigentliche Wissenschaft*, hay motivos de sobra para desconfiar de los estudiosos de Kant que minimizan el impacto de la "revolución química" en el pensamiento kantiano. Avivan la desconfianza pequeños descuidos. Por ejemplo, Förster (1993, p. xxv), editor de la primera traducción (abreviada) del *Op* de Kant en la "definitiva" *Cambridge Edition of the Works of Immanuel Kant*, y autor de numerosas publicaciones sobre el *Op*, se refiere a las *Reflexiones sobre la física y la química* de Kant como las "*Reflexiones* sobre la física". Por supuesto, podría justificarse alegando que el mismo Kant dice explícitamente en una de estas reflexiones que la química es parte de la física.[90] De cualquier manera, me parece significativo que Förster no se tomara la molestia de citar el título completo (o usar en vez de él una abreviatura como *Refl*. o *RFQ*).

Tiendo a preferir aquella parte de la interpretación de Dussort, Friedman y Lequan que pone un acento considerable en las repercusiones que la "revolución química" tuvo en el pensamiento de Kant, sin negar al mismo tiempo las "más importantes" ramificaciones metafísicas para Kant y los kantianos. Las dos perspectivas no son incompatibles si se parte de que desde el principio Kant se ocupó en conjugarlo todo ordenadamente. Y, como dice en la *Danziger Physik*, antes de haber empezado el proyecto de la *Transición* había una laguna en su filosofía. La "revolución química" podía ayudar a cerrar la laguna entre (todas) las ciencias de la naturaleza y la filosofía, fundamentalmente la laguna entre dar una explicación de la materia en general y dar una explicación de la variedad de sustancias.[91]

Quizá una confusión al leer a Kant con ojos modernos sea que para nosotros el cambio de Stahl a Lavoisier es una "revolución química", mientras que para Kant es precisamente el periodo que hace entrar a la química en el ámbito de la ciencia, perder sus raíces alquímicas y, como las *Críticas* de Kant, aspirar a desembarazarse de la filosofía dogmática.[92] Tanto la química como la filosofía operan con ideales reguladores en un camino de progreso histórico y ciencia propia. El prefacio de 1786 representa a la química en su adolescencia (Lequan, 2000, p. 41). En las *Reflexiones* y

en el *Op* la química obtiene su lugar propio, vinculada con el concepto central de éter, que es empírico, trascendental y cosmológico.

Kant siempre había estado en contra del atomismo, y su resolución de explicar la variedad de sustancias consistió en introducir un éter o calórico y el principio de dos fuerzas dinámicas opuestas fundamentales. Su noción de éter fue no sólo una hipótesis empírica, sino un principio trascendental; en este sentido era parte de la filosofía, no de la química. Esto le sugirió, por tanto, la necesidad de una segunda revolución copernicana, o al menos "llenar una laguna" en su filosofía. Dada la decisiva importancia *filosófica* de los problemas planteados por la química, quizá habría que repensar la noción de ciencia de modo que la química pudiera ser una parte propia de ella. Si se iba a decir que era parte de la física, ya sería cuestión de terminología. Física, química, filosofía y matemáticas podrían llegar a ser un todo continuo, sin que cada una pierda su autonomía, o al menos esto es lo que propongo que Kant propondría.[93]

BIBLIOGRAFÍA

Adickes, E., *Kant als Naturforscher*, De Gruyter, Berlín, 1924.

Arabatzis, T., "How the Electrons Spend their Leisure Time: Philosophical Reflections on a Controversy between Chemists and Physicists", en P. Janich y N. Psarros (eds.), *The Autonomy of Chemistry: 3rd Erlenmeyer-Colloquy for the Philosophy of Chemistry*, Königshausen & Neuman, Würzburg, 1998, pp. 149-159.

Bader, R. F. W., P. L. A. Popelier y T. A. Keith, "Die theoretische Definition einer funktionellen Gruppe und das Paradigma des Molekülorbitals", *Angewandte Chemie*, núm. 106, 1994, pp. 647-659.

Brakel, J. van, "Chemistry", *Handbook of Metaphysics and Ontology*, vol. 1, Philosophia Verlag, Múnich, 1991.

———, *Philosophy of Chemistry: Between the Scientific and the Manifest Image*, Leuven University Press, Lovaina, 2000.

Brandt, R., "Kants Vorarbeiten zum *Übergang von der Metaphysik der Natur zur Physik*: Probleme der Edition", en Forum für Philosophie Bad Homburg, *Übergang: Untersuchungen zum Spätwerk Immanuel Kants*, Klostermann, Fráncfort, 1991, pp. 1-27.

Carrier, M., "Kants Theorie der Materie und ihre Wirkung auf die zeitgenössische Chemie", *Kantstudien*, vol. 81, núm. 2, 1990, pp. 170-210.

———, "Kraft und Wirklichkeit. Kants späte Theorie der Materie", en Forum für Philosophie Bad Homburg, *Übergang: Untersuchungen zum Spätwerk Immanuel Kants*, Klostermann, Fráncfort, 1991, pp. 208-230.

———, "Kant's Theory of Matter and his Views on Chemistry", en E. Watkins (ed.), *Kant and the Sciences*, Oxford University Press, Oxford, 2001, pp. 205-230.

Dingle, H., "The Nature of Scientific Philosophy", *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh*, vol. 62, parte IV, 1949, p. 409.

Dirac, P. A. M., "Quantum Mechanics of Many-Electron Systems", *Proceedings of the Royal Society of London*, serie A, vol. 123, 1929, pp. 714-733.

———, "The Relation between Mathematics and Physics", *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh*, vol. 59, 1938-1939, p. 122-129.

Dowdell, V. L. (trad.), *Immanuel Kant: Anthropology from a Pragmatic Point of View*, Southern Illinois University Press, Carbondale, 1978.

Drews, A., *Kants Naturphilosophie als Grundlage seines Systems*, Mitscher & Röstell, Berlín, 1894.

Duhem, P., "Une science nouvelle, la chimie-physique", *Revue philomatique de Bordeaux et sud-ouest*, Hermann, París, 1899, pp. 205-219, 260-280.

Dussort, H., "Kant et la chimie", *Revue philosophique*, núm. 81, 1956, pp. 392-397.

Edwards, B. J., "Der Ätherbeweis des *Opus postumum* und Kants 3. Analogie der Erfahrung", en Forum für Philosophie Bad Homburg, *Übergang: Untersuchungen zum Spätwerk Immanuel Kants*, Klostermann, Fráncfort, 1991, pp. 77-104.

Edwards, J., *Substance, Force, and the Possibility of Knowledge: On Kant's Philosophy of Material Nature*, University of California Press, Berkeley, 2000.

Ellington, J. (trad.), *Immanuel Kant: Metaphysical Foundations of Natural Science*, Bobbs-Merrill, Indianápolis, 1970.

Förster, E., "Kant's Selbstzetsungslehre", en E. Förster (ed.), *Kant's Transcendental Deductions*, Stanford University Press, Stanford, 1989, pp. 217-238.

———, “Die Idee des Übergangs. Überlegungen zum Elementarsystem der bewegenden Kräfte”, en Forum für Philosophie Bad Homburg, *Übergang: Untersuchungen zum Spätwerk Immanuel Kants*, Klostermann, Fráncfort, 1991, pp. 28-48.

Förster, E., (trad y ed.), *Kant's* Opus postumum, Cambridge University Press, Cambridge, 1993.

Forum für Philosophie Bad Homburg (ed.), *Übergang: Untersuchungen zum Spätwerk Immanuel Kants*, , Klostermann, Fráncfort, 1991.

Frenking, G., “Heretical Thoughts of a Theoretical Chemist about the Autonomy of Chemistry as a Science in the Past and the Present”, en P. Janich y N. Psarros (eds.), *The Autonomy of Chemistry: 3rd Erlenmeyer-Colloquy for the Philosophy of Chemistry*, Königshausen & Neuman, Würzburg, 1998, pp. 103-108.

Friedman, M., *Kant and the Exact Sciences*, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1992.

Gregor, M. (trad. y ed.), *Immanuel Kant: The Metaphysics of Morals*, Cambridge University Press, Cambridge, 1991.

Groß, F. (ed.), *Immanuel Kant: Sein Leben in Darstellungen von Zeitgenossen: Die Biographien von L. E. Borowski, R. B. Jachtmann und A. Ch. Wasianski*, Deutsche Bibliothek, Berlín, 1912.

Hartmann, M., *Die philosophische Grundlagen der Naturwissenschaften*, Fischer, Jena, 1948.

Heinig, K., “Immanuel Kant und die Chemie des 18. Jahrhunderts (in der Darstellung der Wissenschaftsgeschichte)”, *Wissenschaftliche Zeitschrift der Humboldt-Universität zu Berlin, gesellschafts- und sprachwissenschaftliche Reihe*, vol. 24, núm. 2, 1975, pp. 191-194.

Heyse, H., *Der Begriff der Ganzheit und die Kantische Philosophie*, Reinhardt, Múnich, 1927.

Hoffmann, R., “Qualitative Thinking in the Age of Modern Computational Chemistry—Or What Lionel Salem Knows”, *Journal of Molecular Structure*, núm. 424, 1998, pp. 1-6.

Hoppe, H. G., *Kants Theorie der Physik: Eine Untersuchung über das* Opus postumum *von Kant*, Klostermann, Fráncfort, 1969.

———, “Forma dat esse rei. Inwiefern heben wir in der Erkenntnis das aus der Erfahrung nur heraus, was wir zuvor in sie hineingelegt heben?”, en Forum für Philosophie Bad Homburg, *Übergang: Untersuchungen zum Spätwerk Immanuel Kants*, Klostermann, Fráncfort, 1991, pp. 49-64.

Janich, P., y N. Psarros (eds.), *The Autonomy of Chemistry: 3rd Erlenmeyer-Colloquy for the Philosophy of Chemistry*, Königshausen & Neumann, Würzburg, 1998.

Kant, I., *Akademie Ausgabe*, 1900-2000.

Körner, S., “On Kant's Conception of Science and the *Critique of Practical Reason”, Kantstudien*, núm. 82, 1991, pp. 173-178.

Lehmann, G., “Zur Frage der Spätentwicklung Kant”, *Kantstudien*, núm. 54, 1963, pp. 491-507.

Lequan, M., *La chimie selon Kant*, Presses Universitaires de France, París, 2000.

Lomonósov, M. V., “Ausgewählte Schriften in Zwei Bänden. Band I: Naturwissenschaften”, Akademie Verlag, Berlín, 1961.

Mainzer, K., “Computational and Mathematical Models in Chemistry: Epistemic Foundations and New Perspectives of Research”, en P. Janich y N. Psarros (eds.), *The Autonomy of Chemistry: 3rd Erlenmeyer-Colloquy for the Philosophy of Chemistry*, Königshausen & Neumann, Würzburg, 1998, pp. 33-50.

Makkreel, R. A., “Kant on the Scientific Status of Psychology, Anthropology, and History”, en E. Watkins (ed.), *Kant and the Sciences*, Oxford University Press, Oxford, 2001, pp. 185-204.

Malzkorn, W., “Kant über die Teilbarkeit der Materie”, *Kantstudien*, vol. 89, 1998, pp. 385-409.

Marty, F. (ed.), *Emmanuel Kant. Opus postumum. Passage des principes métaphysiques de la science de la nature à la physique*, Presses Universitaires de France, París, 1986.

Mathieu, V., *Kants* Opus postumum, Klostermann, Fráncfort, 1989.

Meyer, V., "The chemical problems of today", *Journal of the American Chemistry Society*, núm. 11, 1889, pp. 101-120.

Nayak, A. C., y E. Sotnak, "Kant on the Impossibility of the 'Soft Sciences' ", *Philosophy and Phenomenological Research*, núm. 55, 1995, pp. 133-151.

Needham, P., "Aristotelian Chemistry: A Prelude to Duhemian Metaphysics", *Studies in History and Philosophy of Science*, núm. 27, 1996, pp. 251-270.

Nye, M. J., *From Chemical Philosophy to Theoretical Chemistry: Dynamics of Matter and Dynamics of Disciplines 1800-1950*, University of California Press, Berkeley, 1993.

Paneth, F. A., "The Epistemological Status of the Chemical Concept of Element", *The British Journal for the Philosophy of Science*, núm. 13, 1962, pp. 1-14, 144-160 (publicado originalmente en alemán como "Über die erkenntnistheoretische Stellung des Elementbegriffs", *Schriften der Königsberger Gelehrten Gesellschaft, naturwissenschaftliche Klasse*, vol. 8, núm. 4, 1931, pp. 101-125).

Plaass, P., *Kant's Theory of Natural Science* (traducción, introducción analítica y comentario de A. E. Miller y M. G. Miller; ensayo introductorio de C. F. von Weiszsäcker), Kluwer, Dordrecht, 1994.

Roqué, A. J., "Self-organization: Kant's Concept of Teleology and Modern Chemistry", *Review of Metaphysics*, núm. 39, 1985, pp. 107-135.

Rothbart, D., e I. Scherer, "Kant's *Critique of Judgement* and the Scientific Investigation of Matter", *Hyle*, núm. 3, 1997, pp. 65-80.

Schulze, S., *Kants Verteidigung der Metaphysik: eine Untersuchung zur Problemgeschichte des* Opus Postumum, Tectum, Marburgo, 1994.

Sturm, T., "Kant on Empirical Psychology: How not to Investigate the Human Mind", en E. Watkins (ed.) *Kant and the Sciences*, Oxford University Press, Oxford, 2001, pp. 163-176.

Tuschling, B., *Metaphysische und transzendentale Dynamik in Kants* Opus postumum, De Gruyter, Berlín, 1971.

Vasconi, P., "Kant and Lavoisier's Chemistry", en V. Mosini (ed.), *Philosophers in the Laboratory*, Euroma, Roma, 1996, pp. 155-162.

Watkins, E., "The Argumentative Structure of Kant's *Metaphysical Foundations of Natural Science", Journal of the History of Philosophy*, núm. 36, 1998, pp. 567-593.

Westphal, K. R., "Kant's Dynamic Constructions", *Journal of Philosophical Research*, núm. 20, 1995, pp. 382-429.

Zweig, A. (trad. y ed.), *Immanuel Kant: Correspondence*, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.

---

[*] Instituto de Filosofía, Universidad Católica de Lovaina.

[1] Todas las citas de Kant en este texto se remiten a la *Akademie Ausgabe* (por números de volumen y página), la edición de obras reunidas de Kant publicada entre 1900 y 2000 por la Academia de Ciencias de Berlín; de la *Crítica de la razón pura (KrV [Kritik der reinen Vernunft]*) se dan sólo números de página en el conocido formato A/B de primeras y segundas ediciones, respectivamente. Se consultaron las traducciones disponibles al inglés. Las citas en alemán de las notas son siempre de la *Akademie Ausgabe*.

[2] Véanse, en cuanto a la estructura argumentativa de los *MAdN* (los *Principios metafísicos de la ciencia*

natural), por ejemplo, Plaass (1994) y Watkins (1998). Las citas de los *MAdN* en inglés son de Ellington (1970).

[3] De acuerdo con Weiszsäcker (en Plaass, 1994, p. 174), los *MAdN* tratan "las condiciones en las cuales —en terminología moderna— es posible atribuir significado físico a los conceptos matemáticos".

[4] Se debe distinguir aquí entre "la parte trascendental de la metafísica de la naturaleza" y "una ciencia natural metafísica especial" (4, 470).

[5] Todo conocimiento sistemático puede llamarse ciencia (4, 468). Si el sistematismo se refiere a una relación de "causas y consecuencias", la ciencia es racional.

[6] "So lange also noch für die chemischen Wirkungen der Materien auf einander kein Begriff ausgefunden wird, der sich konstruieren läßt, d.i. kein Gesetz der Annäherung oder Entfernung der Teile angeben läßt, nach welchem etwa in Proportion ihrer Dichtigkeiten u.d.g. ihre Bewegungen samt ihren Folgen sich im Raume *a priori* anschaulich machen und darstellen lassen (eine Forderung die schwerlich jemals erfüllt werden wird), so kann Chemie nichts mehr als systematische Kunst, oder Experimentallehre, niemals aber eigentliche Wissenschaft werden, weil die Prinzipien derselben bloß empirisch und keine Darstellung *a priori* in der Anschauung erlauben, folglich die Grundsätze chemischer Erscheinungen ihrer Möglichkeit nach nicht im mindesten begreiflich machen, weil sie der Anwendung der Mathematik unfähig sind."

[7] *Cf. Danziger Physik* (1785 [29:97]): "Die Mathematik reicht gar nicht zu, den chemischen Erfolg zu erklären oder man hat noch keinen einzigen chemischen Versuch mathematisch erklären können; daher ließ man die Chemie aus der Naturlehre aus, weil sie keine Prinzipien *a priori* hat".

[8] Esta exigencia se sigue del hecho de que la química sería (parte de) una ciencia propia de la naturaleza corpórea (B202).

[9] *Cf*. las palabras "alguna vez" *(jemals*) y "nunca" *(niemals*) en la cita de 4, 470-471. En la *Crítica de la razón práctica*, Kant postula que la química podría alcanzar leyes naturales *a priori* "si nuestro conocimiento fuera más profundo" (5, 26).

[10] De acuerdo con Miller y Miller (en Plaass, 1994, p. 156), la noción de Kant de ciencia propia limita "el paradigma de objetivación común a sólo aquello que puede describirse con determinaciones espacio-temporales" porque esto "se requiere a fin de asegurar la reproducibilidad y mensurabilidad necesarias para matematizar la naturaleza". Tal reproducibilidad exige la posibilidad de aislamiento experimental característica de las ciencias físicas modernas.

[11] La *Gesellschaft deutscher Naturforscher und Ärzte*.

[12] Al parecer muchos químicos alemanes, en particular, se opusieron a la valoración de Kant de la química.

[13] Ellington (1970, nota 8), traductor al inglés de los *MAdN*, alega la siguiente "excusa" para Kant: "Lavoisier dio los primeros pasos de la ciencia química moderna poco antes de la aparición, en 1786, de los *MAdN*. Kant no previó el desarrollo de la física atómica, que habría de transformar la química en ciencia". Volveré a Kant y Lavoisier más adelante.

[14] Dingle (1949) agrega: "Aunque estoy renuente, como debe estarlo un físico leal, a decir nada bueno de la química, no puedo negar que, aparte de su necesidad para las comodidades de la vida, ha sido indispensable para posibilitar el rápido avance de la física".

[15] Bader, Popelier y Keith (1994, p. 650): "Eine wissenschaftliche Disziplin beginnt mit der empirischen Klassifizierung von Beobachtungen. Sie wird exakt in der Sinne, daß Vorhersagen möglich sind, sobald die Klassifizierung die Physik widerspiegelt, die einer Beobachtung zugrunde liegt".

[16] El *3rd Erlenmeyer-Colloquy for the Philosophy of Chemistry* (Janich y Psarros, 1998).

[17] Véase un estudio de la complejidad de la relación entre química molecular, química cuántica y mecánica

cuántica en Van Brakel (2000, cap. 5).

[18] Más adelante Dirac (1939) consideró una reducción adicional de corte pitagórico: "Si expresamos la época presente como 2×10^9 años en cuanto unidad de tiempo definida por las constantes atómicas, obtenemos un número del orden de 10^{39}, que caracteriza el presente en sentido absoluto. ¿No será acaso que todos los hechos presentes corresponden a propiedades de este enorme número y, de modo más general, que toda la historia del universo corresponde a propiedades de la secuencia completa de los números naturales?"

[19] Sobre las enormes repercusiones de la cita de Dirac, véase Van Brakel (2000, p. 120).

[20] Un ejemplo es Hoffmann (1998, p. 4), quien dice en un "ensayo de punto de vista" presentado en una conferencia en honor de los precursores de la química cuántica informática: "[…] sólo los sueños fantásticos de los teóricos de la escuela de Dirac conciben una naturaleza simple".

[21] "Aun así, la doctrina empírica del alma siempre debe permanecer aún más separada que la química del rango de lo que podría llamarse ciencia natural propiamente dicha. Esto es porque la matemática es inaplicable a los fenómenos del sentido interno y a sus leyes […] Sin embargo, ni siquiera como arte sistemático de análisis o como doctrina experimental podrá jamás la doctrina empírica del alma acercarse a la química, porque en ella la multiplicidad de la observación interna está separada sólo por el pensamiento, pero no es posible mantenerla separada y volver a juntarla a voluntad; aun menos se somete a nuestras investigaciones otro sujeto de pensamiento de modo que sea amoldable a nuestros fines, e incluso la observación misma altera y distorsiona el estado del objeto observado. Nunca podrá, pues, llegar a ser más que una doctrina natural sistemática histórica (y en cuanto tal, tanto como sea posible) del sentido interno, esto es, una descripción natural del alma, pero no una ciencia del alma, ni siquiera una doctrina experimental psicológica" (4, 471).

[22] "Nachricht von der Einrichtung seiner Vorlesungen in dem Winterhalbjahre von 1765-66" (2, 316): "[…] metaphysische Erfahrungswissenschaft vom Menschen". *Cf*. *MAdN* (4, 470): "[…] una doctrina pura de la naturaleza referente a cosas naturales determinadas (doctrina de cuerpo y doctrina de alma) es posible sólo por medio de las matemáticas".

[23] *Cf*. cita de la nota 21.

[24] Según Makkreel (2001), para Kant la psicología, la historia, la geografía y en especial la antropología no entran en la categoría de ciencia en el mismo sentido que la física. Son disciplinas sistemáticas guiadas por un juicio reflexivo y no definitivo, y por una idea práctica del "mundo mejor". Cabe señalar que si bien estas disciplinas no pueden pretender erigirse nunca en ciencias exactas, esto no disminuye su objetividad para Kant. De manera similar, Roqué (1985) aduce que Kant relega la organización propia al ámbito del juicio reflexivo, no de la ciencia de tipo newtoniano. Aquí, organización propia se refiere tanto a los organismos biológicos como a las reacciones químicas autocatalíticas (que tendrían, según Kant, un fin físico intrínseco).

[25] Véase B207 y s.

[26] Véase A179/B221, donde Kant parece sugerir que la intensidad de las experiencias del color es medible ordinal y cardinalmente. *Cf*. Sturm (2001, p. 168) y una exposición más minuciosa en Nayak y Sotnak (1995), quienes sostienen que podemos atribuir a Kant la opinión de que la psicometría (o psicofísica) podría ser una ciencia propia, pero que nunca podremos aplicar la matemática a la psique y elevar la psicología a la categoría de ciencia propia.

[27] Para Kant existe una relación entre la percepción sensible y la química por medio de lo que se hoy se llama neurofisiología; *cf*. (7, 157; 12, 34).

[28] *Cf*. notas 32 y 33.

[29] Se trata de una selección de 63 fragmentos (14, 63-537); en las notas se designa *Refl*.

[30] Todas las citas del *Op* en inglés son de Förster (1993).

[31] Según Lequan (2000, notas 6, 81), Kant estaba familiarizado con la obra de Priestley, Scheele, Cavendish, Muschenbroek, Crawford, Boerhaave, Beccher, Macquer, De Luc, Hube, Girtanner, Gren, Hagen, Hales (y, por supuesto, Stahl y Lavoisier), *cf*. (11, 185). Además de absorber y revisar sus teorías, Kant pidió a otros profesores de la Universidad de Königsberg que hicieran experimentos para él (Förster, 1993, p. 275, nota 90). Esto quizá explique el siguiente comentario de un químico de la época de Kant: "[…] es sei ihm unbegreiflich, wie man durch bloße Lektüre ohne Hilfe anschaulicher Experimente die ganze Experimentalchemie so vollkommen wissen könne" (Gross, 1912, p. 129).

[32] Véase en Bxxi una comparación del uso que hacen el filósofo y el químico del método sintético; en B870 y (5, 163), el método de análisis o separación; en (8, 199), el método de abstracción.

[33] Kant, *Crítica de la razón práctica* (1787): "[…] un proceso similar al de la química, esto es, podemos, en experimentos repetidos sobre el sentido común, separar lo empírico de lo racional, presentar cada uno en estado puro, y mostrar lo que cada uno puede lograr" (5, 163); véase una comparación directa entre el filósofo y el químico en este punto en (5, 92). *Cf*. también los *Vorarbeiten zur Rechtslehre* (23, 284): "[…] der Analogie zwischen dem Lavoisierschen System der chemischen Zersetzung u. Vereinigung und dem moralisch-practischen der gesetzlichen Formen u. der Zwecke der practischen Vernunft".

[34] Los estudiosos de Kant difieren en cuanto a dónde exactamente debería localizarse la laguna (si es de índole metodológica o más seria), pero sin duda el término "laguna" es apropiado para indicar la seriedad de lo que falta hasta hoy en el sistema kantiano (además de que el mismo Kant utiliza repetidamente el término). Edwards (2000, p. 152 y s.), que insiste en la continuidad en la filosofía de Kant, también lo usa: "[…] cabía esperar que la ciencia transicional [de Kant] iba a llenar una laguna en la estructura de la metafísica kantiana de la naturaleza (y complementar así el proyecto arquitectónico de la filosofía trascendental de Kant). Se supone que el paso real de los principios metafísicos a la parte empírica de la física debe darse mediante la formulación sistemática de una teoría dinámica de la materia. Esta teoría se funda en el concepto de éter cósmico".

[35] "Die Chemie hat sich in neueren Zeiten zur großen Vollkommenheit emporgehoben; sie verdient auch mit allem Recht den Anspruch auf die gesamte Naturlehre: denn nur die wenigsten Erscheinungen der Natur lassen sich mathematisch erklären—nur der kleinste Teil der Naturbegebenheiten kann mathematisch erwiesen werden so z.B. kann es zwar nach mathematischen Lehrsätzen erklärt werden: wenn der Schnee auf die Erde fällt; wie sich aber Dünste in Tropfen verwandeln oder auflösen können, hier giebt die Mathematik keinen Aufschluß sondern dies muß aus allgemeinen Erfahrungs Gesetzen der Chymie erklärt werden […]" (29, 97-98; *cf*. 29, 100).

[36] Hay huellas de la influencia de la "nueva química" ya en la primera *Crítica*, segunda edición (1787), donde Kant agrega un ejemplo fisicoquímico (transición de estado de fluidez a solidez) a la deducción trascendental (B162), aunque todavía menciona la teoría de Stahl de la calcinación de los metales (Bxiii). La teoría del flogisto de Stahl sigue teniendo plena vigencia en la *Danziger Physik* de 1785, por ejemplo, en (29, 163).

[37] Algunos dirán que las "sustancias" deberían entenderse aquí como "sustancias corpóreas en movimiento". Debo dejar mayormente abierta la pregunta de cómo tomar la o las nociones kantianas de sustancia en el *Op*. Ésta es una cuestión que merecería mayor estudio para evaluar la relación de Kant con la filosofía de la química.

[38] Kant no parecía tener conocimiento de la obra de J. B. Richter, quien obtuvo el doctorado en la Universidad de Königsberg en 1789 con una disertación titulada *De usu matheseos in chymia*, uno de los primeros intentos de lo que después llegó a llamarse teoría de las proporciones químicas (que culminaría en la obra de

Dalton). *Cf*. Friedman (1992, p. 339, nota 167). En relación con Kant, Heinig (1975) señala que ya en 1741 Lomonósov había escrito sobre "los elementos de la química matemática". Ésta es una obra en la que Lomonósov se propone demostrar todos los teoremas químicos, modelando un método con base en el de Euclides, comenzando con presupuestos atomistas: "Wohl verneinen viele, daß man der Chemie die Prinzipen der Mechanik zugrunde legen und sie zu den Wissenschaften zählen kann; aber er verneinen dies solche, die sich in dem Dunkel verborgener Eigenschaften verirrt haben und nicht wissen, daß man in den Veränderungen der gemischten Körper stets die Gesetze der Mechanik beobachten kann […]" (Lomonósov, 1961, p. 72).

[39] Kant señala que en el estudio de las sustancias, la química está limitada de tres maneras: *i*) por el tiempo, porque la naturaleza ha tenido eones para producir transformaciones químicas; *ii*) sus productos nunca son tan puros como los productos naturales; *iii*) sólo unas cuantas de las sustancias que se encuentran en la naturaleza se pueden fabricar artificialmente. Para Kant no existe una frontera definida entre lo inorgánico, lo orgánico y la bioquímica; la cristalización, por ejemplo, tiene para él muchas de las características de los procesos vitales.

[40] Lequan (2000, pp. 112-117) da un útil panorama de los diferentes ámbitos donde, según Kant, la química ofrece modelos teóricos para la meteorología (8, 323-324), la cosmología (8, 74), la psicología (8, 456), la medicina (7, 193, 287, 293) y otras ciencias. La química es también el marco de procesos fisiológicos que "crean" propiedades secundarias de los objetos (5, 349; 6, 400). Por ejemplo, en la *Antropología en sentido pragmático* (7, 177), Kant establece una analogía entre la función catalítica de la afinidad química al tratar el papel de la "facultad productiva sensible de la afinidad" en el discurso social: "La palabra afinidad *(affinitas*) aquí nos recuerda una interacción catalítica existente en la química, una interacción análoga a una combinación intelectual, que vincula dos elementos específicamente distintos entre sí, pero que se afectan íntimamente y pugnan por la unidad con el otro, por lo cual la combinación crea una tercera entidad que tiene propiedades que sólo pueden producirse por la unión de dos elementos heterogéneos".

[41] Véase la primera parte de la cita de la nota 5. *Cf*. Carrier (2001), Lequan (2000, p. 12).

[42] *Übergang von den Metaphysischen Anfangsgründen der Naturwissenschaft zur Physik*. Véanse exégesis en las contribuciones del Forum für Philosophie Bad Homburg (1991), y en Hoppe (1969), Tuschling (1971), Mathieu (1989), Schulze (1994), Lequan (2000). No hay ni remotamente acuerdo en cuanto a cómo interpretar la *Übergang*. Förster (1991) comenta que en la literatura de Kant "herrscht darüber weitgehend Ratlosigkeit" [reina en gran medida la confusión].

[43] "Auf jeden Fall kann keine Rede davon sein, daß Kant in den 90er Jahren hinsichtlich der chemische Literatur auch nur einigermaßen auf dem laufenden gewesen wäre" (Adickes, 1924, I, pp. 63 y ss.). Quizá el juicio de Adickes estaba teñido por la frustración que expresa en una nota de seis páginas con que glosa una oración en (14, 489), citada en la nota 78 de este capítulo; en aquella nota dice: "Doch ist es mir, trotz langen Suchens in der chemischen Literatur der letzten und auch der früheren 80er Jahre des 18. Jahrhunderts, nicht gelungen, einer Stelle habhaft zu werden, die Kant als unmettelbare Vorlage hätte diennen können" (14, 491).

[44] "Die Bände XXI und XXII tragen den prätentiösen Titel *Opus postumum*, aber sie bieten keine Ausgabe der Vorarbeiten Kants zu seinem geplanten Werk, sondern drucken die zufällig zusammengeratene Papiermasse aus dem Besitz der Familie Krause ab. Die Herausgeber erzeugen durch die blinde Wiedergabe der Notizen den Eindruck, der alternde Philosoph habe nicht mehr zwischen einer Ätherdeduktion und seinen Rotweinflaschen unterscheiden können" (Brandt, 1991, p. 8). En cuanto al carácter fragmentario de los manuscritos y las consiguientes dificultades para cualquier interpretación sistemática del *Op*, véanse Adickes (1924, pp. 36-154) y Tuschling (1971, pp. 4-14).

[45] Ha habido varias ediciones en francés y otros idiomas. Todas las ediciones son abreviadas, en parte

porque Kant inició el mismo proyecto una y otra vez; de ahí que haya un grado considerable de repetición. En cuanto al interés específico del *Op* para la química, la obra debe estudiarse en relación con las *Reflexiones sobre la física y la química*, en particular 20, 21, 40-45, 54, 63-66, 73-74, 79.

[46] Carta de Kiesewetter fechada el 8 de junio de 1795: "Sie haben schon seit einigen Jahren einige Bogen dem Publiko schenken wollen, die den Übergang von Ihren metaph. Anfangsgründen der Naturwissenschaft zur Physik selbst enthalten sollten u[nd] auf die ich sehr begierig bin" (12, 23).

[47] Rothbart y Scherer (1997) se remiten a Friedman (1992) y señalan que Kant necesita "una 'transición': llenar sobre bases *a priori* la brecha entre los principios metafísicos de la naturaleza, productos puros del pensamiento, y la naturaleza", pero no parecen haber entendido la importancia de los avances de la química para la *Übergang* de Kant. Lo mismo puede decirse de muchos otros estudiosos del filósofo.

[48] Véase también su carta a Kiesewetter del 19 de octubre de 1978: "Con esa obra se completará la tarea de la filosofía crítica y se llenará la laguna que hoy existe en ella. Quiero hacer de la 'Transición de los principios metafísicos de la ciencia natural a la física' una rama de la filosofía natural *(philosophia naturalis*) que no debe dejarse fuera del sistema" (12, 258). Las traducciones al inglés de la correspondencia de Kant se toman de Zweig (1999).

[49] En varios lugares Kant dice que la química es parte de la física o que ambas son parte de la ciencia natural. Por ejemplo, en *Refl.*, 61: "Chemie ist bloß physik" (14, 470), y en el *Op*: "Die ganze Chemie gehort zur Physik—in der Topik aber ist vom Übergange zu ihr die Rede" (21, 288); "Die Chemie ist ein Teil der Physik aber nicht ein bloßer Übergang von der Metaph. zur Physik.—Dieser enthält bloß die Bedingungen der Möglichkeit Erfahrungen anzustellen" (21, 316). *Cf*. "Esta propiedad, sin embargo, pertenece a la física (química) como sistema" (22, 138), y también (7, nota 177; 14, 40; 22, 161; 4, 530).

[50] Además, no hay experiencia de átomos, ni mónadas, ni puntos matemáticos (21, 218; 22, 555).

[51] Por ejemplo, en *Refl.*, 45, dice que una gota de agua salada puesta en un mar de agua azucarada produce sal en todas partes.

[52] "La materia no consta de partes simples, sino que cada parte es, a su vez, compuesta, y el atomismo es una falsa doctrina de la naturaleza" (22, 212; cf. 22, 554, 611). En primer lugar, la extensión y la impenetrabilidad no son propiedades primarias de la materia, sino que se derivan de fuerzas más fundamentales; en segundo, la materia llena el espacio totalmente; en tercero, la materia es infinitamente divisible: no hay átomos (Carrier, 2001). Véase, por ejemplo, en Malzkorn (1998) un panorama de las distintas posturas hacia la divisibilidad de la materia desde la *Monadología física* a los *MAdN* de Kant.

[53] Carrier (2001, p. 228, nota 14) propone (con referencia a [4, 526]) que Kant quizá haya reconocido que la densidad de los cuerpos macroscópicos es afectada por una multitud de causas distintas a las fuerzas fundamentales.

[54] De ahí las numerosas veces que trata nociones de tesis en las diversas partes del *Op* y también en las *Reflexiones sobre la física y la química*.

[55] Para Westphal el asunto es importante debido al "problema de la circularidad" de los *MAdN*, que ya habían señalado los críticos en vida de Kant. No entraré en esta difícil cuestión interpretativa. Se dice que Kant quizá haya descubierto la circularidad de su definición de cantidad de materia hacia enero de 1792. Los *MAdN* tienen cuatro capítulos: la *foronomía*, en la que "el movimiento se considera cuanto puro" (aquí la "materia" figura sólo a un nivel extremadamente abstracto); la *dinámica*, en la que "el movimiento es visto como perteneciente a aquella cualidad de la materia llamada fuerza motriz original"; la *mecánica*, que es poco más o menos lo que podríamos llamar mecánica: describir los movimientos de los objetos materiales, y la

fenomenología, en la que "el movimiento o el reposo de la materia se determina […] en cuanto apariencia de los sentidos externos" (4, 477). La dinámica estudia la cualidad de las sustancias en relación con las fuerzas dinámicas fundamentales; más precisamente, la cualidad de la materia en la medida en que el movimiento es determinado por una fuerza motriz originaria. Véase la exposición de Lequan (2000, pp. 23-27, 57-62).

[56] Véanse Forum für Philosophie Bad Homburg (1991, xii-xiii), Friedman (1992), Tuschling (1971), Mathieu (1989). Kant trata brevemente la teoría dinámica y el problema de las diferencias específicas de densidad en los *MAdN* en 4, 530-535.

[57] "Porque las matemáticas son el mejor instrumento de la física y el conocimiento que cae dentro de ella (en ese modo de sentido), pero siempre son tan sólo un instrumento para otro propósito" (22, 490; cf. 21, 105, 139).

[58] El estado de agregación y aquello que es la sustancia dependen de la proporción entre las fuerzas atractivas y repulsivas (21, 382).

[59] Véase, también, Edwards (2000) sobre los *Grundsatzes der Gemeinschaft*. Según Kant, debe haber una "comunidad de sustancias" porque es necesaria para la unidad del mundo, en el que todos los fenómenos deben estar entrelazados: "[…] die Erklärung der Möglichkeit der Gemeinschaft verschiedener Substanzen, durch die sie ein Ganzes ausmachen" (Preisschrift über die Fortschritte der Metaphysik, 1791 [20, 283]). *Cf*. A218/B265 y (17, 97, 580; 21, 374, 600).

[60] Esto es, la experiencia en el sentido de algo que puede ser objeto del sentido externo; no la experiencia "en general" (como se trata en la *Crítica de la razón pura*).

[61] "Calórico" es una de las "invariantes" de toda la vida de Kant, adaptada tan sólo por los nuevos avances de la química; véase, por ejemplo, 2, 184-185; 29, 119; 21, 522.

[62] Véase 14, 287-291, aunque hay lugares donde Kant distingue entre éter y calórico. Sobre el tema de usar con frecuencia *Äther* y *Wärmestoff* indistintamente, véase Schulze (1994, pp. 134-141). Para consultar un inventario más o menos completo de los casos en el texto de Kant, véase Schulze (1994, p. 137); en cuanto a las formulaciones del mismo Kant de las propiedades del calórico, véanse 21, 605, 610; 22, 550-551, y, en particular, 22, 214: "Este éter [la única materia *originalmente* elástica, aunque no le sería aplicable el nombre de fluido], una materia elástica de movimiento rectilíneo, se llamaría material ligero; al ser absorbido por los cuerpos, y expandirlos en las tres dimensiones, se llamaría calórico". Entre otros congéneres del calórico y el éter usados por Kant se incluyen *Elementarstoff, Weltstoff, Urstoff, Lichtstoff*. Si se busca una "definición" detallada, pero concisa, del concepto kantiano de éter, véase Edwards (1991, pp. 91 y s.), quien propone que éter, calórico y materia lumínica designan "la entidad-campo universal" constituida por la actividad de las fuerzas atractivas y repulsivas (*ibid*., p. 155).

[63] *Op* (21, 571): "Der *Übergang der metaph. Anf. Gr. der NW zur Physik* geschieht eben durch die Idee von Wärmestoff welcher darum kein blos hypothetischer sondern der allein all Körper in allen Räumen Erfahrungsmäßig leitende und continuirlich in Einer Erfahrung zusammenhängende Stoff sein muß". En las *Reflexiones sobre la física y la química*, el éter no sólo aparece como el fundamento de todas las formas de cohesión, sino como la "matriz de todos los cuerpos". Véase en particular *Refl*., 44. Cada cuerpo está más o menos "saturado" de éter. El éter de "dentro" y de "fuera" forma un *continuum* (*Refl*., 52). Sin embargo, el modo en que se tomen estas aseveraciones dependerá mucho de cómo se interprete el uso o los usos que hace Kant de *Wissenschaft* y *Äther* en el *Op*.

[64] Y, decisivamente, "Die Heterogeneitaet bringt die Perceptibilitaet hervor" (21, 611). Plaass (1994, p. 293) propuso que, ya en los *MAdN*, "Kant apenas es capaz de deducir cómo la materia de distintas densidades es

necesariamente (esto es, *a priori*) posible, a saber, por medio de la necesaria interacción (limitación) oposicional de la repulsión (realidad) y la atracción (como su negación)".

[65] Véase *Refl*., 41 y 44.

[66] *Cf*. Carrier (2001, p. 223) y 4, 530: "Wenn aber zwei Materien und zwar jede derselben ganz einen und denselben Raum erfüllen, so durchdringen sie einander". Sobre los "mixtos" de Aristóteles, véanse *De generatione et corruptione*, 327a, y Needham (1996).

[67] Ésta es una afirmación un tanto especulativa con la que no todos los estudiosos de Kant estarán de acuerdo. En su favor podrían señalarse 21, 223, 563, 576, 579, 600; 22, 160, 161, 551.

[68] Véase 22, 13, 205-212, 474.

[69] "Die erste Ursachen sind nicht mechanisch, sondern dynamico physisch" (14, 211). La idea se desarrolla más en el *Op* (22, 205, 239-240, 474). *Cf*. *Refl*., 41, 43 (14, 165, 270).

[70] La noción kantiana de elemento merecería atención aparte. *Cf*. Carrier (2001), B673-681 (29, 161-166, 341-361). Kant siguió a Stahl en cuanto a considerar cinco elementos, que para él eran más como ideas reguladoras de la razón y nunca pueden identificarse empíricamente. El entendimiento de Kant de estos elementos cambió con el tiempo por influencia de los avances de la química. La teoría kantiana de los elementos en la *Crítica de la razón pura* es trascendental (no empírica ni metafísica).

[71] Uno de los primeros ejemplos de flogisto como quinta esencia en los escritos de Kant se encuentra en 1, 212.

[72] Förster (1989, p. 36); Hoppe (1991, p. 60; 1969, p. 99); Mathieu (1989, p 70); Friedman (1992, p. 297).

[73] Carrier (1991, p. 23) propone que el uso que hace Kant de las palabras *Wärmestoff* y *Äther* en el *Op* es triple; tiene una función trascendental, una química y una cosmológica.

[74] Como advierte Lequan (2000, nota 92), la consideración del éter como hipótesis necesaria no es invención de Kant. El mismo punto de vista puede encontrarse ya en el artículo "Heat" del *Physikalisches Wörterbuch* de Gehler.

[75] Para Kant, tanto la cosmología como la química siempre habían estado estrechamente asociadas con la noción de éter (*cf*. su *Teoría del cielo* de 1755; también 4, 534).

[76] Sobre la pregunta de si es una hipótesis fisicoquímica empírica o una verdad trascendental *a priori*, véanse 21, 216-217, 551, 535-536; 22, 217, 550, y la exposición de Lequan (2000, pp. 89-98).

[77] Dejo las difíciles cuestiones interpretativas referentes a la *Ätherbeweise* del *Op* a los especialistas en Kant: Edwards (2000, pp. 152-157), Schulze (1994), Friedman (1992, pp. 293-341), Mathieu (1989, pp. 231-271), Förster (1991, pp. 41-45; 1989), Lehmann (1963).

[78] Vasconi (1996, p. 157) propone: "[…] es razonable suponer que Kant ya estaba familiarizado con los nuevos descubrimientos desde 1793", en relación con una carta de Erhard (11, 408) que se refiere a los *Anfangsgründe der antiphlogistischen Chemie* de Girtanner, de los que se había enviado un ejemplar a Kant. La primera mención de Lavoisier se encuentra en *Refl*., 66, hacia 1789-1790 (14, 489): "Nach Lavoisier, wenn etwas (nach Stahl) dephlogistirt wird, so kommt etwas hinzu (reine Luft); wird es phlogisticirt, so wird etwas (reine Luft) weggenommen".

[79] *Cf*. 21, 417, 424.

[80] "Ist Wasser Element? Nein denn es läßt sich noch auflösen, es besteht aus Lebensluft und brennbarer Luft, und wir nennen etwas was keine Spezies enthält elementarisch" (28, 664); véase, también, *Refl*., 73.

[81] En un documento adjunto a una carta a S. T. Soemmerring del 10 de agosto de 1795, Kant dice: "Das

reine, bis vor kurzen noch für chemisches Element gehaltene, gemeine Wasser wird jetzt durch pneumatische Versuche in zwei verschiedene Luftarten geschieden" (12, 33). En la *Physische Geographie* (1802) escribe (siguiendo a Gehler): "[…] das Wasser [besteht] aus Wasserstoff und Sauerstoff, und zwar in einer Mischung die bei einhundert Theilen, 15 des ersten und 85 des letßten enthält" (11, 184).

[82] *Op*, hacia 1795 (21, 453): "¿Qué es la química? La ciencia de las fuerzas internas de la materia". La distinción entre cuerpos fluidos y rígidos no puede explicarse sin invocar diversas intensidades de cohesión. Kant toma prestada de Leibniz la idea de que el estado líquido es el estado originario del que se derivan el estado sólido y el de vapor (también se remite a Tales). Desde el punto de vista metafísico esto se apoya en la supremacía química y cosmológica del elemento fluido primordial, esto es, el éter. Véase más en la sección anterior.

[83] (6, 207): "[…] hay sólo una química (la química según Lavoisier)". Pero Kant todavía escribe en el mismo libro: "Los químicos basan sus leyes más universales […] enteramente en la experiencia" (6, 215). En la *Antropología en sentido pragmático* de 1798 se puede leer: "¿Qué cantidad de conocimiento, qué descubrimientos de métodos nuevos no estarían hoy a nuestro alcance si a un Arquímedes, un Newton o un Lavoisier, con su industria y talento, los hubiera favorecido la Naturaleza con cientos de años de vida continua sin pérdida del poder vital?" La versión inglesa es de Dowdell (1978), quien nos informa (p. 288, nota 119) que Kant remplazó a Galileo por Lavoisier en el manuscrito. Las citas de la *Doctrina del derecho* provienen de la edición en inglés de Gregor (1991).

[84] Por lo mismo, también descarta el punto de vista de Tuschling (1971), quien propuso que la función del *Op* era solamente resolver algunas inconsecuencias del concepto de materia expuesto en los *MAdN*.

[85] Véanse, en particular, las notas 4, 5 y 12 de su capítulo 8.

[86] Véanse las referencias de la nota 49, *supra*.

[87] Véanse, por ejemplo, 21, 294, 299; 22, 136-137, 158, 587. Sobre la importancia del éter para explicar la operación de una balanza, véase Hoppe (1969, p. 99). Podría decirse que la obra de Lavoisier, en la que el uso de la balanza desempeñaba un papel decisivo, posibilitó la aplicación de las matemáticas a la química. *Cf. Refl.*, 66 (14, 489-494); Adickes fecha este texto hacia 1789 (con base en la tinta usada). Éste es el año en que Lavoisier publicó su *Traité élémentaire de chimie*.

[88] Dice Laplace en *Œuvres* (II, p. 645): "En général, nous n'avons de sensation que par le mouvement; en sorte qu'on pourrait poser comme un axiome: point de mouvement, point de sensation […] Ce principe s'applique au sentiment du froid et du chaud". Sobre las opiniones de Lavoisier al respecto, véase en particular sus *Réflexions sur le phlogistique* de 1783 (*Œuvres*, II, pp. 623-655). Duhem (1899, p. 214) atribuye a Lavoisier esta cita: "[…] la science des affinités est à la chimie ordinaire ce que la géometrie transcendante est à la géometrie élémentaire" (sin dar la referencia). Esto podría interpretarse como una influencia kantiana en Laplace.

[89] Según Lequan (2000, p. 122), Hegel completó el proyecto de Kant y elevó por completo la química al rango de ciencia propia. Además, al desarrollar el modelo analógico de la química, con Hegel la química se volvió filosófica, y la filosofía, química.

[90] La confusión de creer que en el *Op* Kant se centra sólo en la física surge porque es cierto que Kant suele usar el término "física" para referirse tanto a la física como a la química. Por ejemplo, en 22, 501: "Como ciencia de la experiencia, sin embargo, la física se divide naturalmente en dos disciplinas: la de las formas en acción y reacción de fuerzas en el espacio y el tiempo, y la del complejo de las sustancias que llenan el espacio. Una podría llamarse sistemática de la naturaleza; la otra se llama (conforme a Linneo) sistema de la naturaleza". Sin embargo, otros pasajes dejan en claro que Kant también podría llamar física a la primera y química a la segunda (véanse las citas de la nota 49, *supra*). Después de todo, la pregunta de si Kant localizaría su "laguna" o "transición" en

relación con la física o la química no está ni aquí ni allá.

[91] *Cf*. mi distinción entre "la ontología de la *materia en general*, que ha de tratarse en relación con los adelantos de la micro y astrofísica", y "la ontología de *clases particulares de materia*, esto es, las especies químicas" (Van Brakel, 1991). *Cf*. la "materia en general" de Kant (21, 307) y "der Gemeinschaft verschiedener Substanzen" (21, 571).

[92] *Cf*. "La crítica guarda la misma relación con la metafísica común de las escuelas que la química con la alquimia" (4, 366: *Prolegómenos a toda metafísica futura*).

[93] Estoy muy agradecido con Martin Moors, quien me ayudó a lidiar con las complicaciones de la filosofía de la naturaleza de Kant. Esta investigación recibió el apoyo de un subsidio de FWO-Vlaanderen (número de proyecto 1.5.012.02).

TERCERA PARTE

LA QUÍMICA Y LA FILOSOFÍA CONTEMPORÁNEA DE LA CIENCIA

V. LA ESTRUCTURA CONCEPTUAL DE LAS CIENCIAS

Resurgimiento de la dimensión humana

OTTO THEODOR BENFEY[*]

Introducción

Hace medio siglo, durante un periodo de transición profesional, me di cuenta de un modelo conceptual común subyacente a ciertas áreas de materias que había venido enseñando. Se hizo evidente primero en dos campos y luego en otros terrenos de la ciencia. Durante largo tiempo pareció que otras personas ignoraban el modelo, pero algunos años después Jensen (1988) recogió las ideas y las desarrolló.

En el curso que yo impartía a universitarios de primer año trataba las leyes de los gases ideales y la teoría cinético-molecular que las explica. Mis clases de química orgánica exploraban la teoría estructural de la química orgánica desarrollada en 1858 por Kekulé y Couper. En cada uno de estos campos yo señalaba la necesidad de que la teoría simple inicial se amplificara. Los gases, de hecho, no son ideales; los gases reales no obedecen exactamente a las leyes simples de Boyle, Charles y Gay-Lussac, y la hermosamente simple teoría estructural de 1858 no podía explicar todos los casos de isomerismo.

Lo que se hizo evidente fue que las fallas de ambas teorías y la manera en que se corrigieron tenían algo en común. Las teorías simples al principio no incorporaban todas las dimensiones que son parte de nuestro mundo real. Especialmente notable era el hecho de que ninguna de ellas había incorporado la perspectiva evolucionista, la flecha del tiempo, por la cual quienes vivimos en el siglo XXI encontramos sentido a grandes áreas de las ciencias y sus interrelaciones. La teoría estructural, en efecto, hacía caso omiso del tiempo. Además, ninguna de las teorías en su forma clásica tenía en cuenta el hecho de que los átomos, las moléculas y los enlaces químicos necesitan espacio para existir; no son puntos. Eran dos omisiones decisivas.

Al abordar la teoría cinética de los gases, comenzamos con la conocida ecuación $PV = RT$, que expresa la relación de presión, volumen y temperatura en la escala Kelvin para un mol de gas. Sin embargo, también sabemos que los gases reales divergen de la ley de los gases ideales a presiones altas y temperaturas bajas. Estas divergencias también siguen modelos, uno de ellos propuesto por Van der Waals en su ecuación

$$(P + a / V^2)\ (V - b) = RT$$

Aquí el término b explica el hecho de que la ley original de los gases ideales ignoraba el hecho de que las moléculas de gas ocupan espacio. A alta presión, cuando queda poco espacio vacío, duplicar la presión ya no reduce el volumen a la mitad. El término b introdujo la dimensión de espacio interno, en adelante designada 3d. La ecuación de gases ideales no ignoraba completamente el espacio. Las moléculas de gas se mueven en un espacio externo tridimensional, dimensión que se designa 3D. La teoría cinético-molecular simple que se desarrolló para explicar la ecuación $PV = RT$ también reconoce el número: cuenta las moléculas, la dimensión N.

No obstante, la dimensión N se vuelve problemática a bajas temperaturas; en estas condiciones o a presiones altas, las moléculas se agregan, el número de partículas disminuye y, antes de que esto suceda, hay atracción entre las partículas, de manera que la presión ejercida por el gas es inferior a lo que se espera del comportamiento ideal. Por obediencia a la ley de los gases ideales, la presión se tiene que aumentar con un segundo término que Van der Waals expresa como a / V^2, donde a reconoce la coalescencia natural no numérica, la característica de continuidad que es tan real en la naturaleza como la discontinuidad numérica. Las unidades de gas se unen formando unidades de mayor tamaño. Damos a este aspecto de agregación, de continuidad, la designación A.

Por último, la teoría de los gases ideales requería la inclusión del tiempo. Las moléculas se mueven aleatoriamente, y si las hay en número suficiente en un espacio suficiente, el gas tiene un aspecto uniforme. A esta dimensión de tiempo la llamamos t.

Supongamos ahora que una cámara de moléculas lentas y por tanto frías está conectada con una cámara de moléculas calientes que se mueven con rapidez. Al poco tiempo las dos cámaras tendrán la misma mezcla de moléculas rápidas y lentas. En cambio, si comenzamos con dos cámaras que contienen la misma mezcla y las conectamos, nunca veremos que una cámara recoja todas las moléculas rápidas y la otra las lentas. La física newtoniana era reversible, pero el mundo que describía no lo era. Para afrontar este hecho, consagrado desde luego en la segunda ley de la termodinámica y en el concepto de entropía, tenemos que introducir el tiempo direccional, designado aquí $\nearrow t$.

En resumen, podemos decir que la teoría de los gases ideales requería sólo de N, 3D y t: unidades moleculares, espacio dentro del cual moverse y tiempo para permitir el movimiento. La ecuación de Van der Waals agregó 3d y A, mientras que el

comportamiento unidireccional observado en la mezcla añadió ↗*t*.

Estas seis dimensiones se tratan aquí, y se dividen naturalmente en tres pares: dos se refieren al tiempo, dos al espacio y dos reconocen la dicotomía de continuidad-discontinuidad. Para facilitar su visualización, los pares se pueden representar como las caras opuestas de un cubo (figura V.1), donde la teoría de los gases ideales necesita sólo la mitad de las caras, una de cada par, y las tres se juntan en un vértice del cubo.

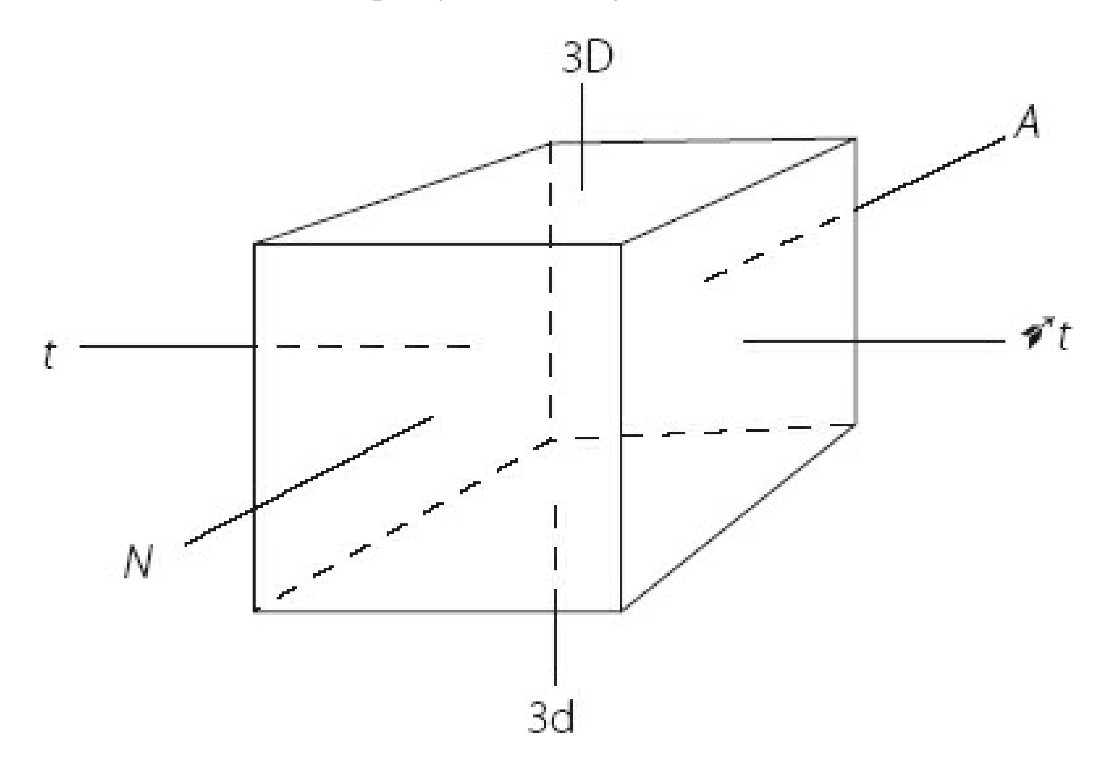


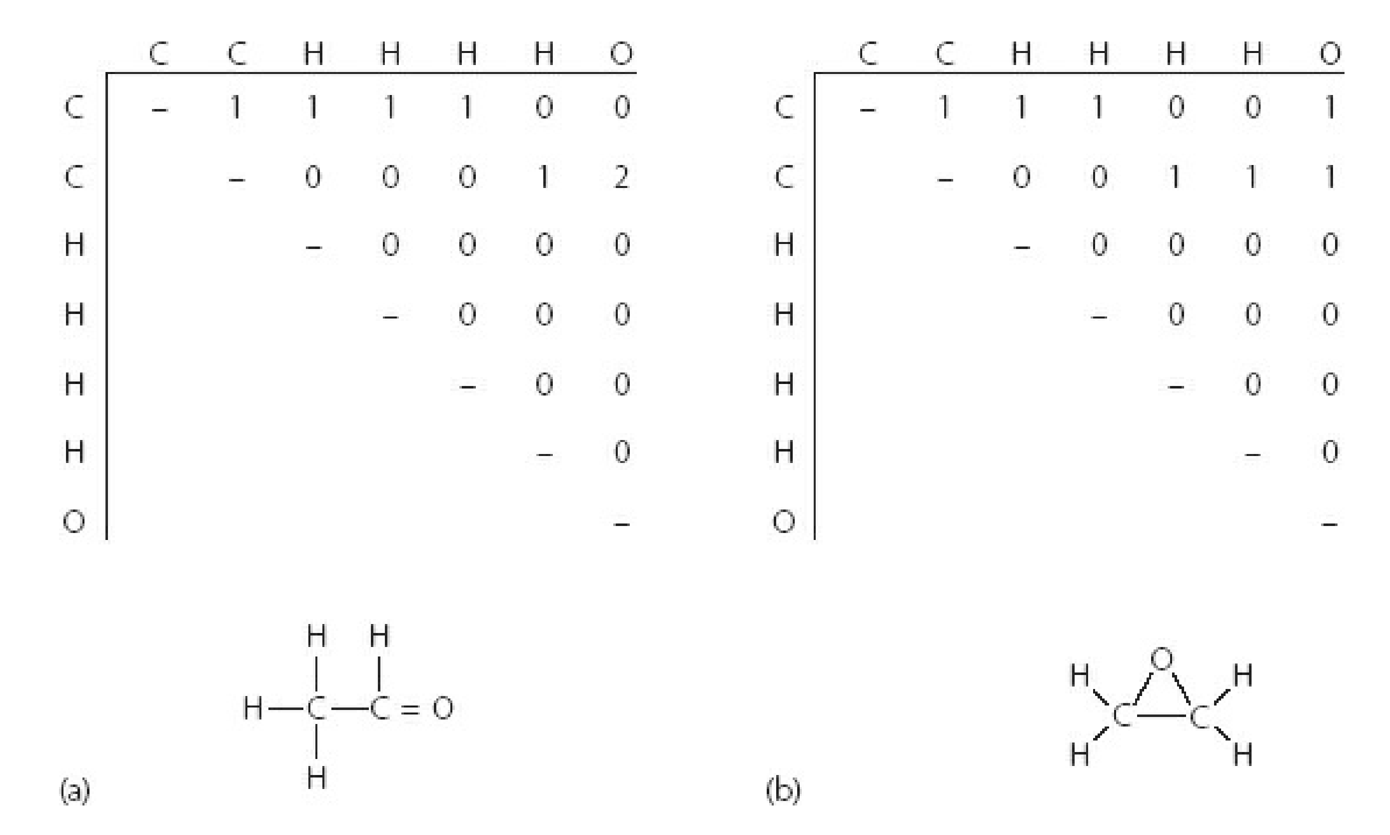
FIGURA V.1. *Representación tridimensional de los seis conceptos tratados en este trabajo. Los seis se presentan en tres pares: uno referente al tiempo (*t *es el tiempo simétrico y* ↗*t el tiempo direccional), el segundo al espacio (3D son las relaciones del espacio externo y 3d la estructura interna) y el tercero a la dicotomía continuidad-discontinuidad (*N *es el número, la cualidad de discreto, y* A *la asociación, la continuidad*).

Antes de profundizar en las implicaciones filosóficas de este sexteto, tenemos que comprobar si el ejercicio vale la pena, si es pertinente fuera del comportamiento de los gases. Examinamos entonces la búsqueda del químico orgánico: el desarrollo de un lenguaje que prediga sin ambigüedad el número de isómeros de una fórmula molecular determinada y que represente a cada isómero como distinto de todos los demás, de preferencia indicando algunas de sus propiedades.

La teoría estructural de la química orgánica, fechada generalmente en 1858, se refiere a los dos principios originales de esta teoría: la tetravalencia del carbono y la capacidad peculiar de los átomos de este elemento para enlazarse entre sí. La teoría está asociada con los nombres de Friedrich August Kekulé y Archibald Scot Couper, quienes la enunciaron de manera independiente uno del otro y con unas semanas de diferencia. Cabe señalar, como elegantemente hicieron Senior (1935) y Wheland (1949), que la teoría estructural, como se le llama de forma casi universal, nada tenía que ver con la estructura geométrica. Se trataba en realidad de una teoría topológica, que especificaba simplemente cuál de los átomos se enlazaba con cuáles otros y mediante cuántos enlaces. La topología es la geometría de la lámina elástica. Siempre que el eje X esté conectado con Y, y éste a su vez esté conectado con Z, la teoría nada dice de si X-Y-Z es lineal o angular o presenta alguna otra deformidad. Para subrayar esto, Wheland escribió algunas fórmulas a modo de tablas de conectividad que listaban solamente el número de conexiones o enlaces (1, 2 o 3) entre cada átomo y los demás (figura V.2).

La estructura dimensional de la teoría estructural era sólo *N*, y cabe advertir que el número *N* no se refiere a átomos, sino a enlaces.

La dimensión espacial 3D fue introducida —también de manera simultánea— por dos químicos, Van't Hoff y Le Bel, para distinguir entre pares o números incluso mayores de isómeros descritos por la misma tabla de conectividad o fórmula estructural clásica, pero cada uno de los cuales reduce el punto de fusión del otro, por lo que no son idénticos. Tal es el caso de los dos ácidos tartáricos ópticamente activos y sus *meso*isómeros inactivos. La nueva rama orgánica de la estereoquímica especificó la dirección en el espacio de los cuatro enlaces que parten radialmente del carbono.



	C	C	H	H	H	H	O
C	–	1	1	1	1	0	0
C		–	0	0	0	1	2
H			–	0	0	0	0
H				–	0	0	0
H					–	0	0
H						–	0
O							–

	C	C	H	H	H	H	O
C	–	1	1	1	0	0	1
C		–	0	0	1	1	1
H			–	0	0	0	0
H				–	0	0	0
H					–	0	0
H						–	0
O							–

FIGURA V.2. *Representación topológica, no espacial, de dos isómeros de la fórmula* C_2H_4O*: acetaldehído (izquierda) y óxido de etileno (derecha). Cada número representa el número de enlaces covalentes que unen el átomo de la izquierda de la fila con el átomo de la parte superior de la columna. Todos los átomos de la molécula se listan tanto en la parte superior como del lado izquierdo. Cada enlace se lista una sola vez, lo que explica el aspecto medio lleno de las tablas. Estas tablas expresan todo lo que se quería representar originalmente con los diagramas estructurales más convencionales.*

Podemos ahora usar nuestro sexteto dimensional para buscar áreas de la teoría estructural no cubiertas por *N* o 3D. ¿Qué ocurre, por ejemplo, con 3d: isómeros que existen sólo porque los átomos ocupan volúmenes finitos? Este caso de isomerismo afloró en la química de los bifenilos, dos anillos bencénicos unidos por un enlace sencillo. Aunque el 2,2'-difluorobifenilo existe en forma de un solo isómero, cuando los átomos de flúor son remplazados por átomos o grupos de mayor tamaño, se pueden aislar los isómeros ópticamente activos. Decimos que estas últimas moléculas presentan inhibición estérica: el tamaño de los sustituyentes impide la planaridad o libre rotación en torno del enlace sencillo que une los dos anillos bencénicos (figura V.3). Este descubrimiento está asociado con los nombres de Christie y Kenner (1922); véase Wheland (1949, pp. 202-214).

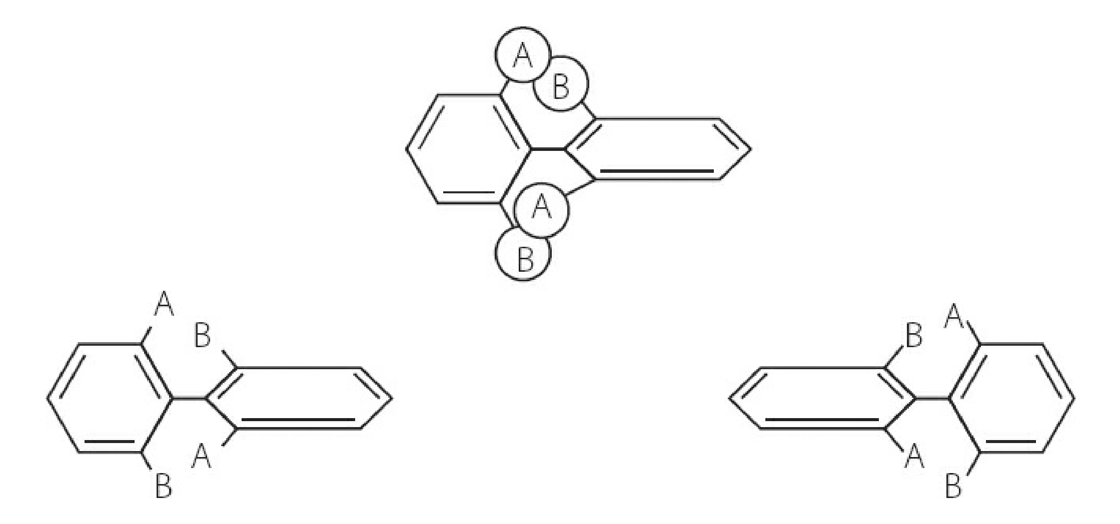


FIGURA V.3. *Isomerismo debido al tamaño finito de los átomos. Si se encuentran en bifenilos sustituidos, los átomos A y B son lo bastante grandes y la molécula no puede ser planar, de lo que resultan dos imágenes especulares.*

La historia de las dimensiones temporales es más larga. La sustancia clave que siempre se presenta como ejemplo es el éster acetoacético (acetoacetato de etilo), sobre el cual Frankland insistió en que era una cetona, mientras que Geuther demostró de manera igualmente convincente que era enólico. El primero publicó pruebas cada vez más incontestables de que pertenecía a las cetonas, rebatidas siempre por otras pruebas que lo adscribían a los enoles.

$CH_3COCH_2CO_2Et$ (cetona) contra $CH_3C(OH)=CHCO_2Et$ (enol)

E. C. C. Bailey llegó a proponer, citando datos espectroscópicos, que la sustancia quizá fuese algo intermedio entre unas y otros. La controversia al fin fue resuelta en 1911 por Knorr, quien enfrió el material a –78 °C, punto en que una de las dos formas se cristalizó, mientras que la otra permaneció líquida. Además, a esa temperatura cada forma podía conservarse inalterada, presentando sus características propias.

Los enigmáticos fenómenos que se observaban a temperatura ambiente se debían a un rápido equilibrio Si se añade un reactivo cetónico, la cetona se elimina y el enol se convierte en cetona hasta que todo el material ha reaccionado. Se produce una reacción análoga si se usa un reactivo enólico. Aquí, evidentemente la característica dimensional es *t*, el tiempo simétrico, ya que el equilibrio puede perturbarse en cualquiera de las dos direcciones y los cambios se producen también en cualquiera de las dos direcciones para restablecer el equilibrio (Ihde, 1959).

¿Plantean los isómeros problemas que exijan la introducción de →*t*: isómeros o ausencia de ellos que sólo sean explicables si introducimos la flecha del tiempo? La respuesta es sí, en el caso de isómeros predichos que nunca se han aislado. Por lo general explicamos su ausencia afirmando que, si se preparan, de inmediato se convierten en una forma más estable. El alcohol vinílico $CH_2=CHOH$ fue durante mucho tiempo el

principal ejemplo, pero hace poco se aisló a muy baja temperatura. Hay, sin embargo, muchos otros que sólo existen en la imaginación del químico, nunca en un tubo de ensayo. Solemos decir que no existen, bien porque se convierten con demasiada facilidad en una sustancia más estable, esto es, la barrera energética para el cambio es insuficiente, bien porque, aun cumpliéndose los requisitos de valencia, no hay manera de que el átomo X se enlace con el Y debido a la complejidad de la estructura. El tiempo aquí va en una dirección: una sustancia se reconoce sólo si existe durante el lapso necesario para ser aislada o al menos para dar una señal espectroscópica de su existencia. Las que no lo hacen se han transformado en otra estructura demasiado pronto en el tiempo unidireccional.

Lo anterior se refiere a estructuras inexistentes. Hay otra clase de estructuras en las cuales el número de las que se han aislado, aunque menor que el de las predichas, no es cero. Ésta es la clase subsumida bajo la teoría de la resonancia. El texto clásico en la materia es el de Wheland (1955), y el ejemplo clásico, el del 1,2-diclorobenceno (figura V.4), que debería existir en dos formas: una con enlace simple y la otra con un enlace doble entre los átomos de cloro que han sustituido a los de carbono.

Cl Cl — Doble enlace entre los átomos de carbono sustituidos

Cl Cl — Enlace simple entre los átomos de carbono sustituidos

FIGURA V.4. *Dos representaciones clásicas del 1,2-diclorobenceno: una con un enlace simple y la otra con un enlace doble entre los átomos de carbono sustituidos. La molécula real tiene un enlace intermedio entre sencillo y doble.*

Sin embargo, sólo un 1,2-diclorobenceno se ha aislado alguna vez, y el enlace entre los carbonos sustituidos tiene propiedades intermedias entre las de uno simple y uno doble. En vez de una barrera energética entre dos sustancias, no existe barrera alguna. De hecho, la estructura real tiene menos energía que las estructuras de enlace de valencia hipotética representadas en la figura V.4. Aquí la teoría estructural se enfrenta al límite del aserto de que implica la dimensión *N*, de que los enlaces deben producirse en unidades, 1, 2 o 3, y no pueden ser intermedios ni fraccionarios. En realidad, el "orden de enlace" de los anillos bencénicos es siempre uniforme, teniendo cada enlace un orden de 1.5. Nos enfrentamos aquí a la dimensión *A*.

Es interesante que Westheimer (1965) desarrollara en la Universidad de Harvard un cursillo de verano de química orgánica estructurado en buena medida como el desarrollo precedente. Empezaba con la teoría estructural simple y luego examinaba casos en los que ésta fallaba:

a) donde había más sustancias que fórmulas: estereoquímica;

b) menos sustancias que las predichas, pero no cero: teoría de la resonancia; o sistemas tautométricos como el éster acetoacético, donde la interconversión era demasiado fácil;

c) estructuras, pero no sustancias: ausencia debida a una conversión demasiado fácil o imposibilidad estérica de enlace.

Hemos encontrado entonces las mismas seis dimensiones: *N, A*, 3D, 3d, *t,* [illegible] *t*, en un área de la ciencia totalmente distinta a la teoría cinética de los gases, lo que nos anima a usar el sexteto dimensional en otras exploraciones.

Dividimos los seis conceptos en tres pares: el primero relativo al espacio, el segundo al tiempo y el tercero a la clásica dicotomía discreto-continuo, ya evidente en la distinción entre aritmética y geometría. Al colocar los miembros de cada par en caras opuestas del cubo de la figura V.1, cada cara queda en contacto con las otras, menos la opuesta. Las caras adyacentes del cubo representan fenómenos que requieren ambos conceptos, pueden explicarse por cualquiera de los dos o llevan a un nuevo desarrollo conceptual que subsume ambos como en el continuo espacio-tiempo de la teoría de la relatividad. El concepto de velocidad requiere tanto dirección en el espacio (3D) como duración en el tiempo *(t*). Como vimos en la sección anterior, ciertas fallas con las que nos encontramos en la teoría estructural de la química orgánica pueden explicarse, bien en función del espacio (3D), bien en función de un tiempo de insuficiente detección ($\nearrow t$). De manera similar, los estratos geológicos pueden describirse como secuencias temporales o espaciales.

Al examinar la representación cúbica advertimos que los tres conceptos centrales de la descripción mecánica clásica de las partículas —*N*, 3D, *t* (partículas, espacio direccional, tiempo)— se presentan como tres caras que comparten un vértice. Las tres caras restantes —tiempo direccional $\nearrow t$, estructura interna 3d y continuidad o carácter asociativo *A*—, que comparten el vértice opuesto, son características de la tradición organicista, como veremos más adelante.

Las caras opuestas, a diferencia de aquellas que comparten una arista, no pueden incorporarse fácilmente en una sola presentación lógica. No debería, pues, sorprendernos que los tres pares de caras opuestas correspondan a *thémata* complementarios, para usar el término de Gerald Holton (1973). De hecho, se encuentran en el centro de los grandes enigmas y las controversias que han marcado el crecimiento y desarrollo de las ciencias en los dos últimos siglos: el problema de cómo el concepto de irreversibilidad puede incorporarse a la física clásica; la dualidad partícula-onda que precipitó las controversias mecanocuánticas, y la dualidad interior-exterior, que se encuentra en la médula de las discusiones relativas a niveles de organización, niveles emergentes y reduccionismo, la pregunta de si el todo es más que la suma de sus partes. Se han hecho repetidos intentos de superar estas dualidades, de subsumir un concepto bajo su contrario, de reducir el uno al otro. Sin embargo, las dificultades de tales empresas han incitado a otros a proponer que ambos conceptos, aunque lógicamente incompatibles, acaso sean necesarios. Es preciso discutir con más detalle los tres pares de conceptos.

Reversibilidad-irreversibilidad (t-[illegible] t)

La dirección del tiempo, la "flecha del tiempo", es parte de todos los procesos de desarrollo evolutivo y orgánico, así como de las transiciones de orden-desorden. Uno de los primeros momentos en que hubo que lidiar con la distinción entre fenómenos reversibles e irreversibles fue cuando se estableció la segunda ley de la termodinámica. En buena medida con base en la obra de Carnot, que introdujo la idea del ciclo reversible para obtener el máximo rendimiento de la máquina de vapor, Clausius agregó a la termodinámica el concepto de entropía. Gibbs y Helmholtz desarrollaron luego una interpretación estadística de la segunda ley, según la cual los sistemas tienden a cambiar hacia los estados de mayor probabilidad y mayor aleatoriedad. Desde entonces se han hecho esfuerzos para derivar de leyes clásicas las conclusiones de predicciones probabilísticas, o para proponer que todas las leyes de la física son de naturaleza estadística. Sólo poco a poco se llegó a reconocer que ambos tipos de concepción son necesarios para cualquier descripción adecuada de los sistemas físicos.

Cassirer resumió su discusión sobre la historia y el actual entendimiento de las afirmaciones probabilísticas (y por tanto de irreversibilidad) en el comentario:

> De todo esto podemos concluir que la "causalidad" y la "probabilidad", el "orden conforme a leyes" y el "accidente", no sólo pueden, sino que deben coexistir cuando queremos determinar un hecho de la manera más completa posible. En la física clásica la causalidad se refiere esencialmente al conocimiento del curso del hecho, y la probabilidad al conocimiento de sus condiciones iniciales. De la combinación de ambos surgen los teoremas de la mecánica estadística [1956, p. 104].

Una descripción científica a menudo comienza con la postulación de un conjunto de entidades contables totalmente distintas *(N*). Sin embargo, se suele tropezar con fenómenos que ponen en duda la validez de la definición inicial de los objetos como entidades separadas. Los objetos presentan un comportamiento indicativo de que tienen afinidad con otros miembros de su clase, o de que son parte de algo mayor. Los criterios para contar el número de entidades individuales a veces llevan al descubrimiento de unidades no enteras, sino fraccionarias. Como respuesta se intentan enfoques de campo u onda, que tratan las entidades antes consideradas distintas como parte de un continuo. Los objetos originales se ven entonces como asociados *(A*) con otros objetos de clase similar en un todo mayor, que no es un simple agregado o colección de sus partes.

Antes de que se propongan transformaciones tan radicales, por lo general se intenta conservar la estructura paradigmática original agregando fuerzas atractivas o tendencias asociativas que operan entre las entidades separadas. Así, en química se invocan las fuerzas de valencia y en la física newtoniana la fuerza de gravedad. En contraste, la perspectiva de un continuo en química considera una molécula a la que mantienen unida orbitales que la envuelven como un todo, mientras que en la física relativista las partículas materiales son vistas como perturbaciones locales en un continuo de espacio-tiempo de cuatro dimensiones.

El ejemplo más conocido de la dualidad discreto-continuo es desde luego la crisis precipitada por los fenómenos de los que hoy se ocupa la teoría cuántica. Cuando las controversias relativas a la naturaleza de onda o partícula de la luz parecían haberse resuelto a favor del punto de vista de que era onda, la explicación de Einstein del efecto fotoeléctrico indicó que la pregunta no era si la luz es onda *o* partícula, y que una respuesta adecuada podría requerir la aceptación de ambas características, de partícula y de onda. De Broglie propuso entonces una dualidad parecida de propiedades para la materia, confirmada al poco tiempo por estudios de difracción de electrones. De nuevo se intentó explicar ambos tipos de comportamiento desde un solo punto de vista. La mecánica ondulatoria de Schrödinger representaba a los electrones como perturbaciones infinitas de onda, mientras que la mecánica cuántica estadística interpretaba el cuadrado de la amplitud de onda como medida de la probabilidad de encontrar un electrón en un punto dado. El principio de complementariedad de Bohr propuso entonces la necesidad de aceptar ambos tipos de observaciones como ingredientes lógicamente irreductibles, pero necesarios, de cualquier representación adecuada del mundo. Cassirer (1956, cap. 9) describe acertadamente este episodio.

Holton (1973, pp. 29, 100) ha señalado que la dualidad discreto-continuo constituye un ejemplo de pares de *thémata* que constantemente reaparecen en el pensamiento y en las elaboraciones teóricas de los científicos. Mendelsohn (1980) ha explorado la aparición periódica de este par de conceptos en el desarrollo de las diversas ciencias y ha propuesto correlaciones con sucesos religiosos, sociales y políticos. Desde el punto de vista del presente capítulo, buena parte de la historia de las oscilaciones pendulares entre las

concepciones de discreto y continuo se basa en la convicción generalizada de que la verdad debe estar de un lado o del otro. En vez de eso, lo que sin duda se necesita es una comprensión profunda de ambos lados para llegar a un entendimiento cabal de cualquier incidente de la ciencia. Mendelsohn señala que ambos lados han vivido en tensión entre sí, una tensión que contribuyó al desarrollo saludable de las ciencias. Sin embargo, ahora su coexistencia también parece epistemológicamente necesaria.

En matemáticas puras, la dicotomía discreto-continuo desempeña un papel central. Según Lewis (1977), Justus Grassmann había señalado ya en 1844 la distinción fundamental entre el enfoque algebraico basado en la unidad discontinua, y las concepciones geométricas nacidas de la idea de un punto a partir del cual se genera una línea continua. Su hijo Hermann Grassmann desarrolló su clasificación de los campos matemáticos con base en esta distinción.

Externo-interno (3D-3d)

Este par de conceptos al principio parece simple, directo y no tendiente a causar problemas filosóficos. Sin embargo, con notable frecuencia un campo de investigación parte de la ilusión atomista de que sus bloques de construcción son unidades imposibles de analizar. El átomo daltoniano (y newtoniano), indivisible y eterno, la molécula puntual de la teoría cinética de los gases, las partículas "fundamentales" de la física, el enlace de valencia, la célula, el núcleo celular, el gen, todos ellos se concibieron en otro tiempo como las unidades del discurso, capaces sólo de relaciones externas con otras entidades; pero más tarde se vio que cada uno tiene complejidad interna, cuya naturaleza hubo que comprender para explicar las relaciones externas. Se intentó entonces explicar el comportamiento externo en función de la composición y la estructura internas, empresa que nunca tuvo éxito cabal debido al inmenso aumento de complejidad que suele producirse al transitar de cualquier nivel de las partes al siguiente "todo" superior (Benfey, 1977). El problema es central en las controversias que rodean al reduccionismo. Por analogía con los otros pares de conceptos que aquí se discuten, parecería admisible suponer que la dicotomía externo-interno es, también en principio, inconciliable.

EXPLORACIONES EN OTRAS ÁREAS DE LA CIENCIA

En esta sección se examinarán otras varias áreas de investigación con el procedimiento usado antes. Tales áreas hacen pensar en una estructura conceptual análoga para numerosos campos.

N-A. Aunque la concepción de Dalton del átomo químico surgió de consideraciones complejas, no hicieron falta más que propiedades bastante limitadas para explicar los datos cuantitativos de la química. Dalton resumió sus opiniones sobre las reacciones químicas en 1808:

> El análisis y la síntesis químicos no van más allá de la separación y la reunión de las partículas. Ni la creación ni la destrucción de materia están dentro del alcance de la operación química. Tan imposible es tratar de introducir un planeta nuevo en el sistema solar, o aniquilar uno ya existente, como crear o destruir una partícula de hidrógeno. Los únicos cambios que podemos producir consisten en separar partículas que se encuentran en estado de cohesión o combinación, y unir aquellas que antes se encontraban apartadas [1808, pp. 162-163].

Dalton procedió entonces a desarrollar una escala relativa de pesos atómicos, tomando como unidad el peso atómico del hidrógeno. Dio por sentado que todos los átomos de un mismo elemento tenían un peso atómico idéntico, y que el peso de los átomos de distintos elementos difería. La combinación química se producía entre pequeños números de átomos de dos o más elementos. Por último, creía que en la mayoría de los casos el compuesto más común de dos elementos suponía la combinación de un átomo de cada elemento, combinación que formaba la partícula más pequeña del compuesto.

Estas proposiciones se limitan esencialmente al concepto de entero *N*, salvo que uno de sus principales propósitos era explicar la combinación de los átomos y por tanto su capacidad para asociarse *(A)*. Entre las primeras discusiones relativas a tales asociaciones se cuentan el punto de vista electroquímico de Berzelius y la misteriosa proposición no eléctrica de Laurent y Dumas. La comprensión de que la asociación puede borrar por completo la identidad de un elemento por medio de la fusión nuclear tuvo origen en los experimentos de bombardeo nuclear realizados en 1917 por Rutherford, quien logró convertir nitrógeno (masa 14), bombardeándolo con núcleos de helio (masa 4), en oxígeno (masa 17) e hidrógeno (masa 1). Esta línea de investigación culminó con el reconocimiento de la fusión del hidrógeno en el Sol y su simulación en la bomba de hidrógeno.

3D-3d. Las relaciones espaciales entre los átomos (3D) se trataron en la sección "La teoría estructural de la química orgánica" (véase, también, Benfey, 1963, 1964). A los siete años de la publicación de Dalton se propuso que los átomos tenían una composición interna (3d) y no eran las unidades indivisibles y últimas de la materia. William Prout, con base en las tablas de peso atómico de Dalton, advirtió que la mayoría de los pesos eran aproximadamente múltiplos enteros del peso atómico del hidrógeno. Propuso entonces que todos los átomos eran agregados de hidrógeno. Quizá estuviera motivado por preocupaciones filosóficas sobre la multiplicidad de los elementos, pues propuso que el hidrógeno podría ser el "protilo de los antiguos" (Prout, 1815, 1816; Benfey, 1952; Brock, 1985). La proposición de Prout condujo a muchas investigaciones fructíferas durante todo el siglo XIX, y después a algunas especulaciones ingeniosas sobre por qué

los pesos atómicos se desviaban de los valores enteros. Mendeléiev (1872), por ejemplo, propuso una posible conversión entre masa y energía.

Paralelamente a la preocupación por pesos atómicos más confiables, Döbereiner y Dumas centraron la atención en las relaciones numéricas entre los pesos atómicos de elementos químicamente similares, en tanto Newlands, Mendeléiev, Lothar Meyer y otros señalaban la recurrencia periódica de elementos de propiedades semejantes cuando los elementos se ordenan por peso atómico de menor a mayor. Meyer y después de él Mendeléiev llamaron la atención hacia la variación pitagórica de sucesión de enteros de la valencia o capacidad combinatoria (1, 2, 3, 4, 3, 2, 1) a lo largo de la escala de pesos atómicos, lo que hacía pensar en algún tipo de estructura de bloques de construcción (Benfey, 1992-1993).

En 1891 G. Johnstone Stoney apuntó que las leyes de la electricidad de Faraday implicaban que ésta se asemejaba a las partículas. Propuso llamar electrón a la carga eléctrica más pequeña. El estudio de los rayos catódicos de Crookes y otros, y las medidas cuantitativas que J. J. Thomson obtuvo de las propiedades del electrón llevaron a este último a inferir que el electrón era un constituyente de todos los átomos. En 1911 Rutherford descubrió pruebas evidentes de la existencia del núcleo atómico. La disposición de los electrones dentro del átomo con base en pruebas espectroscópicas y químicas se exploró ampliamente durante el siglo XX. El carácter 3d de los átomos ha llegado a ser la base de una gran sección de la química teórica que se ocupa de la explicación del comportamiento químico.

t-[illegible]*t*. Mientras los átomos se consideraron eternos e indivisibles, el concepto de tiempo fue el de tiempo reversible. Los espectros atómicos se explican como la absorción reversible de energía de un átomo, la cual lo eleva a un nivel superior de energía, cuyo exceso se reabsorbe en forma de radiación.

Ante la prominencia que cobraron las teorías de la evolución biológica en la segunda mitad del siglo XIX, algunos químicos especularon sobre el proceso por el cual es posible que los átomos se hayan construido con unidades más simples. Crookes (1886) presentó una opinión sobre la evolución de los elementos ante la British Association for the Advancement of Science, según la cual, en la medida en que disminuía la temperatura, el hidrógeno se iba convirtiendo poco a poco, por congelación, en los elementos más grandes. Lockyer (1900) propuso que la construcción de elementos seguía produciéndose en las estrellas.

El hecho de que los átomos no son eternamente estables se hizo evidente cuando Becquerel descubrió la radiactividad, a lo que siguieron las amplias investigaciones de las transformaciones nucleares realizadas por Marie Curie, Rutherford, Soddy y otros. Los átomos no son, pues, bloques de construcción eternos e indivisibles, sino entidades dotadas de historia vital, desde su nacimiento por fusión nuclear a partir de núcleos atómicos más simples, hasta su desintegración espontánea o fusión para formar otros átomos. La desintegración radiactiva es la conversión en el tiempo de algunos átomos en otros, y por lo mismo deja en claro lo poco apropiado de usar los átomos hoy conocidos como puntos de partida para la construcción de la química.

Que las células son los bloques de construcción de plantas y animales es un punto de vista comúnmente asociado con los nombres de Schwann y Schleiden en los años treinta del siglo XIX, aunque muchos otros contribuyeron a la primera formulación de la teoría. En 1831 R. Brown aportó la generalización 3d de que todas las células contienen núcleo, mientras que las relaciones estructurales de las células (3D) en los sistemas pluricelulares se estudian por medio de la microscopía y otros métodos. Schleiden llamó la atención hacia las características asociativas (*A*) de la célula: “Las plantas, desarrolladas en cualquier grado mayor [que los organismos unicelulares], son agregados de seres totalmente individualizados, independientes, separados, a saber, las células mismas […] Cada célula lleva una doble vida: una independiente, pertinente sólo para su propio desarrollo, y otra incidental, como parte integral de una planta” (citado en Singer, 1959, p. 335; texto original en Schleiden, 1838). Sin embargo, a veces resulta difícil delinear las fronteras de la célula, lo que llevó a Weiss (1940) a proponer que ésta se definiera por su núcleo.

La fusión de células y de núcleos celulares (*A*) se produce en la fecundación sexual. Se han preparado células híbridas que contienen varios núcleos, entre las que se incluyen ejemplos de unión de especies diferentes, por fusión, mediante el uso de virus muertos, de las células separadas. En algunos casos se observó también fusión de núcleos (Harris y Watkins, 1965).

La reversibilidad (*t*) de la asociación celular se ha observado en organismos —como ciertas esponjas— cuyas células a veces funcionan como individuos y en otras se unen en sistemas mayores (Weiss, 1940, p. 34).

El crecimiento, desarrollo y reproducción de organismos ([illegible] *t*) siempre ha sido parte integral de los estudios biológicos. En la historia de la teoría celular, la principal generalización conceptual con respecto a la generación celular fue el aforismo de Virchow “Omnis cellula e cellula”:

> Allí donde surge una célula, antes debe haber existido una célula, de la misma manera en que un animal no puede proceder sino de un animal, ni una planta sino de una planta. Así, en toda la serie de seres vivos reina una ley eterna de desarrollo continuo. No hay discontinuidad ni se puede indagar el origen de ningún tejido desarrollado remontándose a otra cosa que a una célula [citado en Singer, 1959, p. 344; texto original en Virchow, 1858].

La construcción evolutiva de las células primitivas con componentes no celulares, los intentos de entender y con esperanza reconstruir las condiciones del “origen de la vida”, ocupan un segmento considerable de la bioquímica hoy en día.

El ensayo de Mendel de 1866 sobre hibridación de plantas proponía un modelo numérico de enteros *(N)* para la distribución de cualidades hereditarias, punto de vista que contrasta marcadamente con las variaciones no cuantitativas, infinitesimales, de Darwin. En su ensayo, Mendel no exploró la naturaleza de posibles unidades particuladas que podrían explicar sus leyes. Otros antes que él (Maupertuis, Buffon, Diderot y Herbert Spencer en sus *Principios de biología* de 1864) habían planteado ideas de herencia particulada.

Mendel añadió un segundo concepto: la idea de dominancia. Los caracteres heredables (alto, bajo; liso, arrugado; verde, amarillo; etc.) se presentaban en pares, uno de cuyos miembros era dominante y establecía su rasgo observable cuando se encontraba presente, mientras que el otro, el gen recesivo, no era perceptible en presencia del opuesto dominante. Estos pares de genes no eran, pues, unidades totalmente independientes, ya que algunos genes eran capaces de influir poderosamente en la expresión de otros. En consecuencia, en las leyes de Mendel ya estaba implícita alguna desviación respecto del concepto *N*, totalmente atomista. Sin embargo, por lo que hace a sus reglas estadísticas, Mendel dio por sentado que las unidades genéticas eran completamente independientes.

Pronto se hizo evidente que no siempre se seguían las reglas, que cuando cierto gen estaba presente, también lo estaba otro, y se desarrolló el concepto de apareamiento o asociación *(A)* de genes. El que este apareamiento no sea absoluto, sino que unas veces resulte más efectivo y otras menos, indicaba que la vinculación génica era cuestión de grado. Fue entonces cuando se desarrolló el punto de vista topológico de la asociación de genes, comúnmente llamado modelo de sarta de cuentas. La vinculación génica podía ser fuerte o débil dependiendo de la proximidad de dos genes entre sí, fenómeno que después se llamó efecto posicional. El reciente hallazgo de que en los seres humanos tan sólo 35 000 genes suministran instrucciones para codificar de 100 000 a 200 000 proteínas (Lewis y Palevitz, 2001) subraya la importancia de la interacción génica. Dobzhansky ya proponía que los genes no se limitan a agregarse mecánicamente, que el cromosoma es más que la simple suma de sus partes:

> Un cromosoma no es simplemente una agregación mecánica de genes, sino una unidad de orden superior […] Las propiedades de un cromosoma están determinadas por aquellos genes que son sus unidades estructurales, y, sin embargo, un cromosoma es un sistema armónico que refleja la historia del organismo, y es en sí mismo un factor determinante de esa historia [1936; 1965, p. 163].

Sin embargo, la interacción y la recombinación génicas, por mucho que se prolonguen en el tiempo, nunca podrán producir nada esencialmente nuevo. La innovación mendeliana fue incapaz de ofrecer un conocimiento profundo de la evolución de las especies. En 1900 De Vries obtuvo experimentalmente nuevas variedades que diferían considerablemente de las generaciones anteriores, y esto llevó al concepto de mutación como cambio interno del gen, que por lo mismo ya no podía ser una sola unidad

indiferenciada, sino que necesariamente tenía una estructura interna (3d). T. H. Morgan logró mutaciones artificiales en moscas de la fruta con agentes químicos, y H. J. Muller con rayos X en 1927; este último desarrolló una imagen de un gen particulado de tamaño finito (3d) gracias a su capacidad para bombardearlo y, por ende, cambiarlo.

El proceso de recombinación génica era irreversible en el tiempo. Dos padres con genes RR y rr, respectivamente, producían en la segunda generación sólo Rr. Si cruzamos entre sí individuos de esta última, revertimos no sólo a los tipos parentales puros, sino a tres tipos de prole: RR, Rr y rr, en proporción 1:2:1. El carácter (→*t*) de la teoría estaba por tanto presente desde el primer ensayo de Mendel.

De la topología lineal de sarta de cuentas, la investigación avanzó al mapeo de los genes de un cromosoma, y más adelante al descubrimiento de que los genes son ácidos nucleicos. Se determinó entonces su constitución química, primero topológicamente según los procedimientos de la teoría estructural clásica de Todd, y por último conforme al modelo estructural tridimensional (3D) de doble hélice del ADN propuesto por Watson y Crick en 1953.

A partir de entonces el acento se ha puesto cada vez más en la función del ADN en la herencia, el proceso en el espacio y el tiempo por el que el ADN se duplica (3D-→*t*) y controla la síntesis de proteínas y los procesos metabólicos que determinan la transmisión hereditaria de características de los progenitores a su descendencia.

La teoría de la tectónica de placas ofrece un sucinto ejemplo moderno de la transformación de un campo científico en una estructura conceptual que incluye los seis conceptos destacados en este capítulo.

> Durante los años sesenta una revolución conceptual sacudió a las ciencias de la Tierra. La nueva visión del mundo alteró de manera fundamental nociones largamente establecidas sobre la permanencia (*t*) de continentes y cuencas oceánicas y aportó percepciones frescas de las causas subyacentes y la importancia de muchas de las principales características del manto y la corteza terrestres. Como consecuencia de esta revolución, hoy se acepta ampliamente que los continentes han cambiado en gran medida ([illegible] *t*) su posición geográfica y modelo de dispersión (3D), e incluso su tamaño (3d) y número (*N*). Estos procesos de deriva ([illegible] *t*), fragmentación (3d) y acoplamiento (*A*) continentales han venido ocurriendo desde hace al menos 700 millones de años y quizá durante más de 2 000 millones de años [Valentine y Moores, 1978].

En la concepción clásica, los continentes se consideraban entidades distintas (*N*), cuyos principales rasgos no sufrían ninguna alteración fundamental, por lo que cualesquiera cambios observados debían ser reversibles (*t*). Se advirtieron las características biológicas y geológicas dentro de cada continente (3d), así como las relaciones geográficas entre ellos (3D). La complementariedad aproximada de forma entre el África occidental y la costa este de América del Sur sugería la existencia de un antiguo puente de tierra, idea reforzada por la estrecha semejanza entre plantas de ambas regiones advertida por Darwin, entre otros. Hubo que abandonar la hipótesis del puente de tierra al no encontrarse ningún indicio de un enlace terrestre sumergido. Entonces Wegener, en 1915, aportó pruebas que hacían pensar en la no permanencia de los continentes, su ascenso y descenso, deriva, fragmentación y fusión. El hecho de que los mamíferos de ambos lados del Atlántico se parecen menos entre sí que las plantas indica que África se desprendió de América del Sur antes de iniciarse la mayor oleada evolutiva de los mamíferos. Así, los continentes también tienen un pasado evolutivo ([illegible] *t*) y no pueden considerarse entidades unitarias últimas, pues hoy se cree que se han fusionado y fragmentado, y que en otro tiempo eran parte de una sola masa de tierra (*A*) (Wegener, 1966; Takeuchi *et al.*, 1970).

Lo que ha ocurrido con nuestra concepción de los continentes se parece mucho a nuestra visión de las estrellas. Inalterables e independientes al principio, hoy se sabe que están en proceso de evolución y son parte de los sistemas mayores: las galaxias y los sistemas galácticos.

Estudios comparativos: la tabla periódica y la gran cadena del ser

Quizá los ejemplos dados basten para mostrar la amplia aplicabilidad del análisis de los seis conceptos a determinadas áreas de estudio. Estos análisis también deberían ser útiles para fines comparativos; un ejemplo es el análisis paralelo de la clasificación periódica de los elementos químicos y el concepto biológico de la "gran cadena del ser". La comparación fue propuesta por Lovejoy: "La teoría de la Gran Cadena del Ser, por puramente especulativa y tradicional que fuera, tuvo en la historia natural de este periodo un efecto algo parecido al que la tabla de los elementos y sus pesos atómicos ha tenido en la investigación química del último medio siglo" (1936, p. 232; *cf*. Benfey, 1965).

Tanto las clasificaciones de los elementos de Newlands, Meyer y Mendeléiev como la cadena del ser de especies de plantas y animales apuntaban a miembros faltantes cuyas características estaban definidas con bastante claridad, lo que permitía una búsqueda más focalizada y menos aleatoria. Ya era posible buscar elementos o especies en lugares particularmente prometedores para llenar los huecos con buenas probabilidades de éxito.

La cadena del ser y la tabla de los elementos adquieren una escala de tiempo (↗t)

La cadena del ser era originalmente un esquema sin tiempo, en el cual todas las especies susceptibles de ser creadas lo habían sido en el mismo instante. Se pensaba que sólo así se habían podido manifestar el amor y la omnipotencia de Dios. Sin embargo, el esquema, sometido a un análisis más riguroso, condujo a dificultades filosóficas y éticas, al tiempo que tropezaba con pruebas cada vez más convincentes de que algunas especies, aunque potencialmente capaces de existencia, nunca habían aparecido, mientras que otras, pese a haber existido alguna vez, hoy están extintas, lo que rompe la cadena. Entonces ésta se "temporalizó" y más adelante se ramificó, transformándose en el siglo XIX en un proceso en evolución.

Los átomos, los bloques de construcción de los elementos químicos, retuvieron su carácter atemporal durante más tiempo que las especies; sin embargo, como ya se dijo, los estudios de radiactividad y transformación nuclear llevaron a la convicción del origen evolutivo de los elementos. La tabla periódica de los elementos se ha temporalizado al considerarse que los átomos más pesados se produjeron a partir de los más ligeros en la historia primitiva del sistema solar, mientras que la formación de elementos sigue produciéndose en las estrellas.

La continuidad en la escala de pesos atómicos y la discontinuidad en la cadena de los seres (A-N)

Para Dalton, un elemento se caracterizaba por la masa de sus átomos particulares. La

escala de pesos atómicos era discontinua y, con el desarrollo de la tabla periódica, no cabía esperar elementos nuevos entre los ya conocidos situados en lugares adyacentes. Sin embargo, a principios del siglo XX se descubrieron los isótopos, es decir, átomos del mismo elemento pero de distinta masa, y se conocieron muestras de uranio de pesos atómicos muy variables. Los isótopos de un elemento se consideraron entonces agregados de un número dado de protones y distintos números de neutrones, lo que hizo pensar en un modelo de masas isotópicas (las masas de protones y neutrones son casi idénticas, mientras que los electrones, el tercer constituyente de los átomos, son mucho más ligeros) basado en números enteros. Este renacimiento del pitagorismo, sin embargo, fue efímero porque los pesos atómicos reflejan la intensidad de la cohesión interna, y parte de la masa se pierde en la síntesis de partículas; la magnitud de la pérdida está dada por la ecuación de Einstein $E = mc^2$. Así, la escala de masas atómicas se volvió menos pitagórica, más continua.

Por otra parte, las gradaciones continuas supuestas dentro de la gran cadena del ser y en vista de la variabilidad espontánea postulada por Darwin cedieron ante el cambio discontinuo de las leyes genéticas de Mendel y el posterior descubrimiento de las mutaciones biológicas. Ambas clasificaciones, pues, han tropezado con los parámetros tanto de lo discreto como de lo continuo *(N-A)* en su desarrollo.

Relaciones externas y composición interna (3D-3d)

Las relaciones espaciales entre organismos son centrales en los estudios ecológicos y en el concepto de territorialidad. El correlato químico es el estudio de las interacciones químicas, es decir, la estereoquímica (la teoría estructural de la química orgánica y los tipos de enlace entre átomos).

Como se ha dicho, la estructura interna de los átomos ha llegado a ser una base esencial para explicar su comportamiento externo. En el caso de un organismo, la configuración y la estructura interna determinan su lugar en la cadena del ser o en el esquema evolutivo. La configuración interna, antes limitada a detalles anatómicos, hoy alcanza, en el plano microscópico, las secuencias de aminoácidos de la proteína vegetal o animal y el ADN.

Evidentemente, debería ser posible llevar a cabo estudios interdisciplinarios de conceptos particulares. Toulmin y Goodfield (1962-1963; 1965) examinaron la incorporación del concepto de tiempo direccional *t* a las ciencias físicas y biológicas, en tanto Mendelsohn (1980), como se ha dicho, exploró los conceptos de discreto y continuo.

Muchas historias de la ciencia siguen escribiendo su cronología científica como si la tradición mecanicista, simbolizada por los enfoques galileanos de los fenómenos naturales, hubiera triunfado en el Renacimiento sobre todos los contendientes. Por lo regular sólo se menciona su victoria aparentemente decisiva sobre la concepción "organicista", sin tener en cuenta para nada una tercera corriente del pensamiento renacentista, a veces conocida como la tradición mágica. Un análisis de los seis conceptos demuestra que las tres tradiciones nos siguen acompañando.

Kearney (1971) y Kirsch (1981) han señalado tres principales modos de ver la naturaleza en el Renacimiento: el organicista, el mecanicista y lo que ellos llaman la tradición mágica y que Debus (1977) designó como "filosofía química".

Los seis conceptos identificados en este capítulo y representados en el cubo de la figura V.1 tienen una correspondencia asombrosa con estas tres tradiciones. La tradición mecanicista, como vimos al discutir la teoría cinética de los gases, se relaciona estrechamente con los tres conceptos *N, t* y 3D: número, tiempo y extensión espacial, que se juntan en un vértice del cubo. En el vértice opuesto concurren *A*, $\vec{t}$ y 3d: continuidad, flecha del tiempo y complejidad interna, conceptos que encontramos en todas las discusiones de los organismos. Y la tradición mágica nos prepara para aceptar contrarios aparentemente inconciliables: onda-partícula, tiempo reversible y direccional, el todo y su complejidad interna (Debus, 1977, 1980). Estos pares se presentan en caras opuestas del cubo.

En la biblioteca de la Universidad de Pensilvania se expusieron durante varios años en una vitrina ejemplares originales de libros clásicos de esta tercera tradición, junto con un comentario de Arnold Thackray:

> En el mundo del filósofo natural del siglo XVI y principios del XVII la astrología y la astronomía apenas se diferenciaban —tanto Brahe como Kepler hicieron horóscopos y se entregaron a la adivinación general—, y la química era tanto una filosofía oculta como una ciencia empírica. Las armonías cósmicas, las influencias astrales, el misticismo numerológico del neoplatonismo y la piedra filosofal eran parte integral de la cosmovisión de Paracelso, Dee, Della Porta, Fludd y sus contemporáneos, quienes percibían el universo como una "gran cadena del ser". Entre los elementos de esta tradición de alquimia, magia natural y hermetismo se cuentan la búsqueda de simpatías y antipatías en la naturaleza y un acento en la semejanza del hombre, el microcosmos, con el macrocosmos. Se insistía en la experiencia como el camino al entendimiento apropiado de la naturaleza, y por medio de esta comprensión de los fenómenos el mago adquiría control [1981].

La tradición hermética, por extraño que parezca desde el punto de vista moderno, representa otro hilo que se entretejió en la ciencia moderna en sus albores. Hasta tiempos recientes desatendida por la historia de la ciencia, fue parte inseparable del ambiente intelectual de distintas épocas, con un atractivo tan generalizado como perdurable.

La tradición hermética surgió en parte porque en la Europa medieval las opiniones de Aristóteles y otros griegos, aunque incorporadas en gran medida al pensamiento cristiano, se consideraban de origen pagano. Se creía que la tradición judeocristiana tenía nuevos conocimientos intuitivos que aportar al entendimiento del mundo material. Los sacramentos hablaban de la transformación de la materia en algo más que materia, los relatos de la creación sostenían un origen común a seres vivos y no vivos, y la doctrina del Espíritu Santo fomentaba la meditación y la confianza en la intuición como medios alternativos a la razón para ganar conocimiento y entendimiento. Además, la creencia en la revelación continua alentaba la confianza en la experimentación como factor

importante para descubrir verdades insospechadas.

La tradición mágica tuvo pocas oportunidades de florecimiento durante el periodo de los primeros éxitos del mecanicismo de Galileo, Newton y Descartes. Los fenómenos químicos eran refractarios al enfoque, y se les encontró sentido durante un tiempo mediante generalizaciones iatroquímicas y flogísticas. La física de Newton nunca pudo explicar la afinidad selectiva o limitada que presenta un elemento químico cuando se expone a otro. Si dos átomos de hidrógeno tenían afinidad entre sí, ¿por qué no tres o cuatro o 34? Sólo la teoría cuántica, un siglo después, pudo dar una explicación.

El punto de vista mecanicista se enfrentó con otros problemas. Faraday introdujo el concepto de campo —quizá procedente de los chinos por conducto de Leibniz— para explicar los fenómenos magnéticos, seguido más tarde por el de éter como vehículo de las ondas de luz. Y el éter no se proscribió hasta que Einstein demostró que no había necesidad de él. La segunda ley de la termodinámica, desde luego, era completamente no newtoniana.

En el siglo XX varios pensadores empezaron a proponer que debíamos acudir otra vez a la tradición organicista de Aristóteles y la física medieval en busca de penetración y dirección. Needham (1962) señaló que los notables éxitos de la ciencia china anterior a la influencia occidental, esto es, hasta el siglo XVII, se basaron en un punto de vista organicista. Cuando el enfoque mecanicista se llevó a China —y esto ocurrió casi tan pronto como se desarrolló en Europa—, fue acogido con suspicacia y se enfrentó con mucha resistencia. Needham supone que era necesario explorar por completo la tradición mecanicista, pero que ahora convendría verla como una desviación necesaria en el camino a una ciencia más madura.

Hace más de medio siglo Whitehead (1948), al mirar la nueva física, sugirió que las partículas elementales, los átomos y las moléculas empezaban a parecerse más a organismos biológicos muy apartados de las ideas atomistas griegas. La física, propuso, estudiaba los organismos pequeños, la química los intermedios, y la biología los grandes.

Los chinos también tuvieron intuiciones profundas que, con su simbolismo de yin y yang, recuerdan la tradición mágica. Creían que como parte integral de la naturaleza y de la experiencia humana hay muchos opuestos diametrales que coexisten necesariamente, como luz y oscuridad, masculino y femenino, crecimiento y decadencia.

Holton (1973) ha discutido a fondo conceptos contrarios como los que encontramos en las caras opuestas del cubo de la figura V.1 y que se relacionan con la tradición mágica. Señala que, además de los datos y su manipulación racional, analítica, el científico lleva a su trabajo presupuestos básicos, un elemento intuitivo, una dimensión temática. Newton concebía la luz como partículas, Huyghens como ondas. En el siglo XX, tanto el enfoque del continuo de la mecánica de ondas como la mecánica estadística cuántica buscan explicar el comportamiento de los electrones en los átomos. Los griegos, para hacer frente al desagradable hecho del cambio, tendieron a seguir las ideas atomistas de Empédocles, Demócrito y Leucipo, en las que éste se considera como el simple reacomodo de los mismos elementos inmutables. Los chinos, por su parte, aceptaban el cambio como algo fundamental y todo lo explicaban en función de él. Para ellos el

cambio no era un problema. Los problemas se explicaban en función del cambio.

Los temas y antitemas (términos de Holton) se debatieron con vehemencia durante décadas, y no fue hasta tiempos recientes cuando nos dimos cuenta de que a veces los dos enfoques contrastantes son necesarios para el entendimiento cabal de los fenómenos. Niels Bohr, más que nadie, insistía en la frecuente necesidad de aceptar conceptos aparentemente opuestos y recalcaba la complementariedad tanto en las ciencias naturales como en otros campos, tal como la psicología. Cuando en 1947 Dinamarca le concedió el título de caballero de la Orden del Elefante, eligió como escudo de armas el símbolo del yin y el yang, con el lema *Contraria sunt complementa*: "los contrarios son complementarios" (Holton, 1973, cap. 4, "Las raíces de la complementariedad").

Con el reconocimiento de que las caras opuestas del cubo apuntan hacia pares conceptuales del tipo destacado por la tradición mágica, llegamos a la sorprendente conclusión de que la ciencia contemporánea no ha descartado en absoluto ninguna de las tres tradiciones anteriores. Aunque la opinión general siga sosteniendo que la tradición mecanicista logró una victoria decisiva y prescindió del punto de vista organicista, mientras que la tradición mágica no se considera siquiera digna de mención, un análisis de los seis conceptos demuestra que las tres tradiciones siguen muy vivas (Benfey, 1982).

Durante los dos últimos siglos, pese a la enorme proliferación de la investigación y la especulación científicas, las ciencias se han acercado más entre sí en el sentido de que son conceptualmente menos diversas. Basta contrastar el grado de unidad logrado en nuestro tiempo con la diversidad de conceptos centrales que caracterizaba a las ciencias a fines del siglo XVIII y principios del XIX: la teoría del flogisto, el atomismo de Dalton, el fluido calórico, la física newtoniana, la gran cadena del ser, el catastrofismo, el uniformitarismo. Los golfos conceptuales separaban y aislaban a muchos de ellos, e impedían amalgamarlos en una síntesis más grande.

Hoy en día no hay líneas divisorias precisas que separen las diversas ciencias. A cualesquiera límites que nominalmente sigan separándolas se superponen las fronteras de la investigación. El marco conceptual que subyace a los varios campos de la ciencia hoy está en gran medida unificado, y muchos conceptos clave se usan de forma idéntica en todas las disciplinas. Otros conceptos, más o menos confinados a un campo específico, son aun así compatibles entre sí y con el marco más amplio. ¿Cómo se adaptó conceptualmente cada campo o subcampo para ocupar su lugar en este acercamiento contemporáneo? No es probable que muchos científicos previeran esta convergencia de su ciencia con otras como resultado de sus respectivas labores. Tropezaron con problemas conceptuales dentro de sus especialidades y usaron toda la perspicacia y el ingenio de que pudieron armarse para superarlos. A fin de introducir conceptos nuevos que se agregaran o sustituyeran a los viejos, tomaron préstamos de otros campos de la ciencia, de disciplinas no científicas o de su experiencia cultural general. Couper encontró la clave del orden en el confuso amasijo de fórmulas químicas analizándolas como si fueran palabras de una lengua desconocida, mientras que Kekulé las consideró desde el punto de vista de su anterior contacto con la arquitectura. Este capítulo propone una metodología para demostrar el camino de la acreción de conceptos, el crecimiento de los agregados conceptuales que son parte de la síntesis moderna.

Parece que un método útil es centrarse en determinados subcampos, eligiendo al principio aquellos que comenzaron con una estructura conceptual particularmente simple. Los subcampos que conducen en especial al rastreo de la acreción de conceptos son aquellos que se desarrollaron en lo que podría llamarse el modo galileano.

Galileo realizó sus experimentos de planos inclinados con bolas tan perfectamente esféricas como era posible, que rodaban sobre planos de la mayor lisura posible. Así esperaba evitar complicaciones debidas a la resistencia del aire y la fricción. Creía que éstas podían incorporarse después, una vez que la ley "ideal" básica quedara establecida. Francis Bacon objetó con vehemencia este procedimiento, señalando que los fenómenos de la naturaleza debían observarse en toda su complejidad, que las hipótesis debían desarrollarse reconociendo lo que todos los fenómenos tenían en común. Aseguraba que por ese camino había averiguado que el calor era una forma de movimiento.

Bacon quizá haya visto en el procedimiento de Galileo la continuación del método epicíclico de los astrónomos medievales, que describían la trayectoria de un planeta

primero por el círculo mayor, el deferente, al que luego añadían los epiciclos para explicar las desviaciones del movimiento circular puro. Galileo usó un procedimiento análogo en su estudio de los procesos dinámicos en la Tierra. Quizá lo hiciera como consecuencia directa de que Copérnico había colocado a la Tierra entre los planetas, sugiriendo así que los mismos procedimientos metodológicos son aplicables a ambos.

Este capítulo se inició, pues, con el análisis de dos subcampos de las ciencias físicas. Cada uno comenzó con una estructura conceptual extremadamente simple y luego fue incorporando conceptos nuevos hasta que la estructura conceptual de ambos llegó a ser la misma. Cabe la pregunta de si esto fue una coincidencia trivial o tiene mayor significación. Ni las ciencias ni el estudio de la historia de la ciencia pueden conformarse con la acumulación de hallazgos de la investigación. Deben buscar modelos organizadores, y la historia de la ciencia aspira a conocer los caminos por los que se desarrollan las ciencias. Este capítulo propone una línea de desarrollo en el mismo sentido: la transformación conceptual interna de todos los campos, subcampos y paradigmas, hasta que alcancen una forma asimilable al esquema moderno. Espero que otros historiadores emprendan esta tarea en los campos de su especialidad. Cuando se disponga de análisis detallados de varios campos, será posible compararlos en busca de paralelismos o individualidad entre ellos y podrán hacerse proposiciones sobre las razones de los paralelismos que se encuentren. Además, si se observa que un conjunto conceptual en un campo de investigación carece de uno o dos conceptos comunes a la mayoría, esto quizá indique que podrían lograrse descubrimientos significativos si los científicos miraran en tal o cual dirección. Es así como se encontraron elementos nuevos cuando se desarrolló la tabla periódica.

El conjunto de conceptos identificado en este capítulo como común a casi todas las áreas de la ciencia moderna está muy lejos del que describe una partícula eterna, newtoniana o daltoniana, porque sus conceptos son mucho más ricos. Contiene, como hemos visto, el tiempo direccional, que se adapta de forma mucho más satisfactoria a una descripción de organismos en un marco evolutivo.

Una integración previa de las ciencias que se acerca, en cierto modo, en magnitud a la ciencia contemporánea se puede discernir tan sólo en la síntesis medieval-aristotélica, que semeja el punto de vista actual en algunos de sus aspectos organicistas, pero que difiere de él en su enfoque atemporal, jerárquico, que contrasta con la presente concepción evolucionista. El punto de vista moderno lo coloca todo, desde las partículas elementales hasta los acontecimientos de la historia humana, pasando por moléculas, células y organismos, en un marco temporal continuo. El enfoque newtoniano, que se anunció con tanta esperanza y confianza, y bajo cuyo influjo seguimos operando en gran medida, nunca pudo subsumir a la química, por no hablar de las ciencias aún menos mecánicas.

El intento newtoniano de sintetizar las ciencias fue un método que tenía fines de dominación y reducción. El éxito de la física newtoniana planteó la posibilidad de que otras áreas de la ciencia se libraran de nociones no operacionales y se volvieran campos analítico-prescriptivos limitándose al paradigma subyacente de partículas eternas interactivas que obedecen a leyes de corte newtoniano. El presente capítulo propone una

síntesis por una ruta esencialmente opuesta: no por reducción, simplificación y dominio, sino por crecimiento, enriquecimiento y adaptación mutua de las diversas áreas de la ciencia. La síntesis newtoniana fue un programa y una esperanza. La unidad lograda bajo el marco contemporáneo, en cambio, es algo con lo que tropezamos casi sin darnos cuenta. Los científicos no trabajaban con vistas a una meta de unificación, sino que resolvían sus problemas particulares.

Sin embargo, no puedo coincidir con la opinión de que las ciencias han desarrollado su actual forma conceptual casi al azar, adquiriendo, descartando y alternando periódicamente ciertos conceptos o *thémata* con base en preferencias personales o experiencias culturales locales. En la comunidad intelectual mundial parecen estar en juego tendencias mucho más grandes, que nos desvían de una visión jerárquica fija de la naturaleza hacia una visión en desarrollo, histórica, evolutiva, en la que se producen novedades significativas reales y en la que ya no pueden ignorarse aspectos del yin y el yang, complementarios, "mágicos". Quizá buena parte de lo que ha ocurrido en los dos últimos siglos haya sido la adaptación de todos los aspectos de la ciencia a su principal transformación intelectual.

Hemos identificado un conjunto de seis conceptos más descriptivos de organismos que de bloques de construcción, pero que difieren considerablemente de la concepción organicista de la física medieval. Esa concepción buscaba entender el comportamiento de los cuerpos materiales dotándolos de intenciones, capacidades y sentimientos relacionados con los de los humanos. Sin embargo, el conjunto de seis conceptos que se discute en el presente capítulo es también un conjunto estrechamente vinculado con la experiencia humana. Como persona, estoy consciente de mí mismo en cuanto entidad aislada capaz de realizar acciones y ser objeto de ellas. Reconozco a otros individuos semejantes a mí mismo. Viéndolos como seres atómicos separados, los trato como enteros, los cuento y los agrupo, implicando el concepto numérico *N*. Ordeno mi experiencia dentro de una matriz de espacio (3D) y tiempo (*t*), considerando al espacio simétrico y al tiempo reversible en el sentido de que en gran parte de la vida lo que se hace también puede deshacerse. La reflexión y la experiencia introducen la flecha del tiempo $\rightarrow t$ como la irrevocabilidad de la muerte, las consecuencias irreversibles de ciertas acciones, la experiencia del crecimiento, la maduración y el envejecimiento. También cobro conciencia de procesos alteradores, de la imposibilidad de "desrevolver" un huevo revuelto. El dolor y el ejercicio físicos me hacen consciente de la estructura interna, 3d, cuando advierto que hay algunas partes de mi cuerpo que pueden fallar, influyendo sobre el todo. Cobro conciencia asimismo de una estructura interna en mis procesos mentales al enfrentar mis enredados pensamientos y sentimientos. Por último, aprendemos que somos animales políticos, que no somos sino parte de la sociedad, que también somos parte inseparable de nuestro entorno físico y biológico. Empezamos a cuestionar la validez de considerarnos seres aislados, atómicos. La conciencia religiosa de sabernos parte de algo más grande se relaciona con el concepto asociativo *A*.

Mientras que algunas adiciones conceptuales han llegado a ser tan de todos los días que parecen evidentes, otras no han influido gran cosa sobre nuestro modo de concebir

las entidades de la naturaleza. En química orgánica, la idea de que las moléculas tenían estructura geométrica fue rechazada con vehemencia la primera vez que se planteó, pero se ha vuelto central en nuestro modo actual de visualizarlas. Aunque el tiempo (en los dos sentidos) es igualmente importante en la definición de las moléculas, los químicos poco han hecho para cambiar su concepto de moléculas como estructuras atemporales.

El camino recorrido por la ciencia moderna desde el sublime optimismo acerca de la aplicabilidad universal de leyes de corte newtoniano hasta el actual reconocimiento de profundos obstáculos filosóficos que frenan nuestro avance hacia un mayor entendimiento, quizá nos deje menos sorprendidos ante el notable éxito del enfoque chino de la ciencia y la tecnología durante los 15 primeros siglos de nuestra era (Needham, 1959). La concepción china de las fases complementarias del yin y el yang, y de un organismo universal constituido por organismos componentes, condujo a un gran conocimiento intuitivo que ayudó a ordenar la experiencia humana y a muchos descubrimientos, algunos de importancia decisiva en el vertiginoso desarrollo de la ciencia moderna a partir del Renacimiento. El que China no llegara más lejos sin duda se debió a la parcialidad de su propio desarrollo científico. Hoy parece posible que el enfoque racional analítico, cuantitativo, que caracteriza la ciencia moderna sea también parcial, y que sólo trascendiendo esta limitación puedan las ciencias avanzar a un nuevo nivel de comprensión.

AGRADECIMIENTOS

Doy las gracias a Kenneth Caneva, de la Universidad de Carolina del Norte en Greensboro, con quien tuve muchas discusiones sobre una versión anterior de este capítulo durante un año sabático en 1979-1980; y a Gerald Holton, de la Universidad de Harvard, por sus valiosos comentarios.

BIBLIOGRAFÍA

Benfey, O. T., "Prout's Hypothesis", *Journal of Chemical Education*, núm. 29, 1952, pp. 78-81.

——— (ed.), *Classics in the Theory of Chemical Combination*, Dover Publications, Nueva York, 1963; reed. Robert E. Krieger Publishing Co., Malabar, Florida, 1981.

Benfey, O. T., *From Vital Force to Structural Formulas*, Houghton Mifflin, Boston, 1964; reed. American Chemical Society, Washington, D. C., 1975; reed. Chemical Heritage Foundation, Filadelfia, Pensilvania, 1992.

———, "The Great Chain of Being and the Periodic Table", *Journal of Chemical Education*, núm. 42, 1965, pp. 39-41.

———, "The Limits of Knowledge", *Chemistry*, núm. 50, marzo de 1977, pp. 2-3.

———, "The Concepts of Chemistry – Mechanical, Organicist, Magical, or What?", *Journal of Chemical Education*, núm. 59, 1982, pp. 395-398.

———, "Precursors and Cocursors of the Mendeleev Table: The Pythagorean Spirit in Element Classification", *Journal for the History of Chemistry*, núm. 13-14, invierno-primavera 1992-1993, pp. 60-66.

Brock, W. H., *From Protyle to Proton: William Prout and the Nature of Matter 1785-1985*, Adam Hilger, Boston, 1985.

Cassirer, E., *Determinism and Indeterminism in Modern Physics*, caps. 7 y 8, O. T. Benfey (trad.), Yale University Press, New Haven, Connecticut, 1956.

Christie, G. H., y J. Kenner, "The Molecular Configurations of Polynuclear Aromatic Compounds. Part I. The Resolution of 6:6'-Dinitro- and 4:6:4':6'-Tetranitro-diphenic Acids into Optically Active Components", *Journal of the Chemical Society*, núm. 121, 1922, pp. 614-620.

Crookes, W., *Reports of the British Association for the Advancement of Science*, 567; se reproducen fragmentos y su diagrama de las "gigantescas oscilaciones pendulares" de la evolución de los elementos en E. Farber, *Chymia*, núm. 9, 1963, p. 193.

Dalton, J., *A New System of Chemical Philosophy*, 1808; ed. facsimilar, The Citadel Press, Nueva York, 1964, pp. 162-163.

Debus, A. G., *The Chemical Philosophy*, Science History Publications, Nueva York, 1977.

———, "Mysticism and the Rise of Modern Science", *Journal of Central Asia*, núm. 3, 1980, pp. 46-61.

Dobzhansky, T., "Position Effects on Genes", *Biological Reviews*, núm. 11, 1936, p. 382; cit. en L. C. Dunn, *A Short History of Genetics*, McGraw-Hill, Nueva York, 1965, p. 163.

Harris, H., y J. F. Watkins, "Hybrid Cells from Mouse and Man: Artificial Heterokaryons of Mammalian Cells of Different Species", *Nature*, núm. 205, 1965, pp. 640-646.

Holton, G., *Thematic Origins of Scientific Thought*, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1973, pp. 107-109.

Ihde, A., "The Unravelling of Geometric Isomerism and Tautomerism", *Journal of Chemical Education*, núm. 36, 1959, pp. 333-336.

Jensen, W. B., "Logic, History, and the Chemistry Textbook: I. Does Chemistry Have a Logical Structure?", *Journal of Chemical Education*, núm. 75, 1988, pp. 679 y ss., nota 1.

Kearney, H., *Science and Change 1500-1700*, caps. 1 y 4, McGraw-Hill, Nueva York, 1971.

Kirsch, A. S., "Introducing 'Chemical Bonds' ", *Journal of Chemical Education*, núm. 58, 1981, pp. 200-201.

Lewis, A. C., “H. Grassmann’s 1844 *Ausdehnungslehre* and Schleiermacher’s Dialektik”, *Annals of Science*, núm. 34, 1977, pp. 103-162.

Lewis, R., y B. A. Palevitz, “Genome Economy”, *The Scientist*, vol. 15, núm. 12, 2001, pp. 19-21.

Lockyer, N., *Inorganic Evolution as Studied by Spectrum Analysis*, Macmillan, Londres, 1900, p. 166; cit. en E. Farber, *Chymia*, núm. 9, 1963, p. 196.

Lovejoy, A. O., *The Great Chain of Being: A Study in the History of an Idea*, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1936; reimpr. por Harper and Row, Nueva York, 1960, p. 232.

Mendeléiev, D., “Das periodische System der Elemente: Prognose neuer Elemente”, *Liebigs Annalen* (supl. 8), 1872, pp. 206-207; trad. inglesa en E. Farber, *Chymia*, núm. 9, 1963, p. 187.

Mendelsohn, E., “The Continuous and the Discrete in the History of Science”, en O. G. Brim, Jr., y J. Kagan (eds.), *Constancy and Change in Human Development*, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1980.

Needham, J., *Science and Civilization in China*, 7 vols., Cambridge University Press, Cambridge, 1959 y ss. (muchos publicados en secciones múltiples y otros en prensa); vol. 2, 1962, pp. 291-294, 493-505.

Prout, W., “On the Relation between the Specific Gravities of Bodies in their Gaseous State and the Weights of their Atoms”, *Annals of Philosophy*, núm. 6, 1815, pp. 321-330 (publicado anónimamente pero identificado en el siguiente artículo).

———, “Correction of a Mistake in the Essay on the Relations between the Specific Gravities…”, *Annals of Philosophy*, núm. 7, 1816, pp. 111-113.

Schleiden, M. J., “Beiträge zur Phytogenesis”, *Müllers Archiv für Anatomie und Physiologie*, 1838, p. 137; citado en C. Singer, *A History of Biology*, 3a. ed., Abelard-Schuman, Nueva York, 1959, p. 335.

Senior, J. K., “An Evaluation of the Structural Theory of Organic Chemistry”, *Journal of Chemical Education*, núm. 12, 1935, (I) pp. 409-414, (II) pp. 465-472.

Takeuchi, H., S. Uyeda y H. Kanamori, *Debate about the Earth*, Freeman, Cooper and Co., San Francisco, 1970.

Thackray, A., “Statement of the Hermetic Tradition”, University of Pennsylvania, cortesía de Arnold Thackray, 1981.

Toulmin, S., “The Discovery of Time”, *Memoirs and Proceedings of the Manchester Literary and Philosophical Society*, vol. 105, núm. 8, 1962-1963, pp. 1-13.

———, y J. Goodfield, *The Discovery of Time*, Hutchinson, Nueva York, 1965.

Valentine, J. W., y E. M. Moores, “Plate Tectonics and the History of Life in the Oceans”, en L. F. Laporte (ed.), *Evolution and the Fossil Record*, W. H. Freeman and Co., San Francisco, 1978, pp. 193-202; reimpreso de *Scientific American*, núm. 230, abril de 1974, pp. 80-89.

Virchow, R., *Cellularpathologie*, August Hirschwald, Berlín, 1858; citado en C. Singer, *A History of Biology*, 3ª ed., Abelard-Schuman, Nueva York, 1959.

Wegener, A., *The Origins of Continents and Oceans*, Dover Publications, Nueva York, 1966; trad. de *Die Entstehung der Kontinente und Ozeane*, 4ª ed., Friedr. Vieweg & Sohn, Brunswick, Alemania, 1929.

Weiss, P., “The Problem of Cell Individuality in Development”, *American Naturalist*, núm. 74, 1940, pp. 37-46.

Westheimer, F. H., “A Summer Short Course in Carbon Chemistry: The Structural Theory of Organic Chemistry”, *Chemistry*, vol. 38, núms. 6 y 7, 1965, pp. 12-18 y 10-16.

Wheland, G. W., *Advanced Organic Chemistry*, 2ª ed., John Wiley and Sons, Nueva York, 1949.

———, *Resonance in Organic Chemistry*, John Wiley and Sons, Nueva York, 1955.

Whitehead, A. N., *Science and the Modern World*, New American Library, Nueva York, 1948.

---

[*] Guilford College, 909 Woodbrook Drive, Greensboro, Carolina del Norte, 27410, EUA. Dirección electrónica: benfeyot@infionline.net

VI. FILOSOFÍA NORMATIVA Y DESCRIPTIVA DE LA CIENCIA Y EL PAPEL DE LA QUÍMICA

ERIC R. SCERRI[*]

Desde la muerte del positivismo lógico, el enfoque puramente normativo de la filosofía de la ciencia se ha impugnado cada vez más. Muchos filósofos de la ciencia hoy se consideran naturalistas, y es cuestión de qué tipo de naturalismo estén dispuestos a defender. Como bien se sabe, uno de los asuntos centrales en el debate sobre el naturalismo se refiere a si la filosofía ofrece un punto de vista privilegiado desde el cual estudiar la naturaleza de la ciencia, o si esto se consigue mejor estudiando la ciencia misma.[1]

La situación a menudo se resume en el aforismo de que no se puede deducir “un deber de un ser”. No parece que tengamos derecho a formular conclusiones normativas sobre cómo debería proceder idealmente la ciencia con sólo observar de qué manera lo hace ahora o lo hacía antes, pues sería un argumento circular. En realidad, la única circunstancia en que el epistemólogo normativo recalcitrante tendría en cuenta algún aporte del naturalismo sería si pudiera demostrarse de manera concluyente que los agentes racionales son literalmente incapaces de pensar tal y como el esquema normativo requiere que lo hagan.[2]

Hablo como si el enfoque normativo fuera en cierto modo más respetable, y el naturalismo representara un intruso reciente en el escenario filosófico. Propongo que corresponde a los naturalistas la responsabilidad de demostrar trar que su postura puede tener alguna influencia sobre la filosofía normativa, y no a la inversa. Ciertamente tal es el caso ahora, pero las cosas no siempre fueron así. La filosofía normativa y la filosofía de la ciencia no siempre ocuparon el centro del escenario. Ocurrió de este modo como consecuencia del trabajo de Gottlob Frege en Jena a fines del siglo XIX. El desarrollo de la lógica moderna realizado por Frege pronto condujo a esfuerzos por basar toda la filosofía en el análisis del lenguaje, programa promovido por Russell, Wittgenstein, Carnap y muchos otros. El programa de Frege llevó a echar por tierra la entonces vigente filosofía naturalista, que recurría a los descubrimientos y la práctica científicos en busca de iluminación filosófica.

Antes de Frege, el estudio de la psicología y el de la biología evolutiva *gozaban* en realidad de gran prestigio entre los filósofos de la época. El psicologismo en particular no se consideraba el “pecado mortal” de cuya posibilidad Frege convenció después a los filósofos analíticos.

Hoy han decaído la confianza en el análisis de la estructura lógica de las teorías científicas y el enfoque que supone una “filosofía primera” o *a priori*. Los filósofos *ya* exploran ideas de psicología, biología, física, ciencia política, economía, computación, y parece que han empezado a considerar incluso el campo de la química (Van Brakel, 2000; Bhushan y Rosenfeld, 2000). Podría decirse que todas estas incursiones caen bajo la etiqueta genérica de naturalismo. Los proponentes de tales enfoques comparten la oposición a la línea de Frege y Wittgenstein según la cual la filosofía es en cierto modo más fundamental que todas estas otras ramas del conocimiento.

Quisiera dedicar unas líneas más a explorar cómo se ha aflojado el lazo corredizo que

Frege puso a la filosofía analítica. En términos llanos, los requisitos de la postura de Frege pueden enunciarse así:

i) La lógica, y no la psicología, es el medio apropiado para la filosofía.
ii) La reflexión filosófica ha de considerarse como *a priori*.

No es de extrañar que los naturalistas modernos pongan en duda tanto el requisito *i* como el *ii*. Una de las principales razones por las que *i* se ha reconsiderado, y por las que ha habido un retorno al psicologismo, puede atribuirse al trabajo de la epistemología. En 1963 Edmund Gettier dio algunos ejemplos para mostrar que en ciertos casos es posible tener una creencia verdadera y justificada sin que, no obstante, se tenga conocimiento (Gettier, 1963). Filósofos como Dretske y Goldman han sido precursores en la formulación de respuestas a estos enigmas, que invocan los estados psicológicos de los agentes cognoscentes (Dretske, 1981; Goldman, 1992).

Entre tanto, *ii* se ha cuestionado en varios frentes. En primer lugar, Quine presentó los famosos artículos en los que argumentaba que no era posible hacer una distinción clara entre enunciados analíticos y sintéticos (Quine, 1951). En consecuencia, parecería rechazarse cualquier esperanza de enfoque totalmente *a priori* de la filosofía. Sin embargo, a pesar de otras conocidas contribuciones de Quine, como su lema de que "la filosofía de la ciencia es suficiente filosofía", y su adhesión general a una epistemología "naturalizada", su propia obra permaneció inmersa en el análisis lógico y no dio señales de empeñarse en un examen de la ciencia en sí.

Vino entonces el viraje historicista de la filosofía de la ciencia debido a Kuhn, Lakatos, Toulmin, Feyerabend y Laudan, entre otros. Estos autores hicieron mucho por señalar la importancia de la historia de la ciencia en el estudio de la metodología científica. Además, los escritos de Kuhn en particular dieron origen, para bien o para mal, a la sociología de la ciencia y a industrias de estudios científicos que aseguran estudiar la ciencia como se practica en realidad e insisten en la necesidad de ir más allá del análisis de las teorías. Digo para bien o para mal porque, en mi opinión, el problema de la sociología de la ciencia ha sido la obsesión con el contexto de los avances científicos y la relegación de la ciencia propiamente dicha que interviene en ellos.[3] Lo que muchos de estos autores han hecho es llevar el naturalismo demasiado lejos, de manera que han terminado en el relativismo. Éste es, desde luego, uno de los conocidos peligros del naturalismo en general.

Entre los más destacados proponentes actuales del naturalismo se cuentan Ronald Giere y Larry Laudan (Giere, 1985, 1989; Laudan, 1987, 1990). Quizá la principal diferencia entre ellos sea la insistencia de Laudan en que el suyo es un tipo de naturalismo también normativo, mientras que la pretensión de normatividad es bastante menos acentuada en la versión de Giere, aunque no está del todo ausente como parecen creer algunos comentaristas.

Otro autor que defiende el naturalismo es Philip Kitcher. Su artículo de 1992, aparecido en el número del centenario de *Philosophical Reviews*, presenta uno de los

relatos más claros de la historia del naturalismo y las diversas posturas que hay en la actualidad (Kitcher, 1992). A esto siguió un libro titulado *The Advancement of Science*, en el que Kitcher afirmaba estar haciendo filosofía naturalista de tipo moderado, pero, como han señalado algunos críticos, parece que el autor no cumple su promesa (Solomon, 1995). Él abunda en el análisis formal de episodios científicos como la revolución química y no puede menos que preguntarse, como en el caso de los escritos de Quine, dónde se habrá escondido la verdadera ciencia.

Por supuesto, aun así hay muchos filósofos, incluidos Siegel y Doppelt, por ejemplo, que siguen rebatiendo la noción misma de filosofía "naturalizada" de la ciencia (Siegel, 1985, 1989; Doppelt, 1990).

Es todo lo que puedo decir a modo de introducción, pero ¿cuál es la pertinencia de la química con respecto a estas cuestiones? Ante todo, si por naturalismo se entiende mirar a la ciencia misma, y no operar meramente dentro de un análisis lógico de los conceptos, entonces en la química hay todo un campo de la ciencia que nunca se ha considerado seriamente. El aparente desdén por la química es sorprendente, tanto más cuanto que los químicos constituyen, con mucho, el mayor grupo de científicos: personas dedicadas, por estudio o trabajo, a cualquiera de las ciencias.[4]

Sin embargo, el punto que quiero dejar claro en este artículo es que en cierto modo sí es *posible* deducir "un deber de un ser", aunque hago esta afirmación en un sentido más restringido que el habitual. Argumentaré que, partiendo de un enfoque naturalista de la naturaleza de la química, podemos hacer recomendaciones normativas a los químicos y profesores de química. La pregunta más amplia de si es posible hacer afirmaciones normativas sobre la ciencia en general es más difícil y la evitaré por el momento. No obstante, si lo que digo acerca de la química es correcto, entonces quizá podría generalizarse fácilmente a otras ramas de la ciencia (Siegel, 1985, 1989, 1990; Doppelt, 1990).

He empezado a darme cuenta de que mi propia investigación en la filosofía de la química ha consistido en un cambio gradual, por el que al principio fui partidario de un punto de vista normativo en asuntos como los orbitales atómicos y las configuraciones electrónicas, y en tiempos más recientes adopté una postura "naturalizada". Ahora defiendo el uso crítico de tales conceptos antes que centrar la atención en el hecho de que, en rigor, son incapaces de referirse a entidades del mundo físico. Quisiera ahora desandar parte de los pasos de mi investigación.

En el caso de un átomo polielectrónico o una molécula, el conmutador que involucra el operador hamiltoniano y el operador correspondiente al momento angular de un electrón individual $[H, \ell_x]$ es distinto de cero. Esto implica que en ningún caso los autovalores correspondientes a un electrón individual son constantes de movimiento o, usando la jerga técnica, son buenos números cuánticos, y no puede decirse que describan el movimiento con ninguna exactitud. Por ejemplo, en ausencia de acoplamiento espín-órbita, sólo la suma vectorial de todos los operadores de momentos angulares individuales, o L, y no la de los momentos angulares individuales, o ℓ, representa buenos números cuánticos. Otra manera de enunciar este resultado es que ningún electrón por separado de un átomo polielectrónico se encuentra en estado estacionario, sino que sólo el átomo en su totalidad se encuentra en estado estacionario. Pueden formularse argumentos similares para otros números cuánticos como m_l y m_s, los cuales también implican la estricta ruptura al asignar cuatro números cuánticos a cada electrón en los sistemas polielectrónicos.

Sin embargo, más importante que la naturaleza aproximada del concepto de orbital es el hecho categórico de que éste no se refiere a ninguna entidad física. Aquí tenemos la suerte de contar con un ejemplo inequívoco que no deja a los propios prejuicios filosóficos la decisión de adoptar una interpretación realista o antirrealista. El análisis matemático dicta de manera bastante categórica que el muy admirado, y muy representado, concepto de orbital atómico no tiene una existencia física "real" o independiente. De hecho, el uso del término "orbital" antes que el de "órbita" no expresa realmente la ruptura radical con la noción de trayectoria continua de las partículas elementales, que se produjo como consecuencia del advenimiento de la mecánica cuántica.

Desde luego, aun así es posible usar las complejas expresiones matemáticas correspondientes a las diversas soluciones orbitales al problema del átomo de hidrógeno, para desarrollar una función de onda que se aproxime a la de un átomo o una molécula polielectrónicos. En tales casos utilizamos los orbitales de manera puramente instrumental para modelizar la función de onda del átomo o la molécula, y no hay pretensión alguna, al menos por lo que toca a los especialistas en el campo, de que los orbitales constituyentes empleados en este procedimiento de modelización tengan existencia independiente. Contra las afirmaciones aparecidas recientemente en la revista *Nature* y

en muchas otras publicaciones, los orbitales no se han observado (Scerri, 2000b, 2001).

Lo que durante varios años he venido argumentando en relación con los orbitales es un aserto normativo surgido de dedicar una atención estricta a la mecánica cuántica. Sin embargo, poco después de que empecé a publicar estas ideas, Robin Hendry comentó que, según algunos análisis filosóficos de teorías científicas, mi postura estaba un tanto pasada de moda.

La crítica de Hendry de mi artículo de 1991[5] decía poco más o menos que el asunto que yo planteaba no tenía la significación filosófica que le atribuía. En cuanto a mi señalamiento de que la interpretación realista de los orbitales monoelectrónicos era estrictamente incongruente con la mecánica cuántica, Hendry afirmaba que en mi evaluación me circunscribía al modelo de explicación nomológico-deductivo. Este modelo invoca leyes fundamentales para la explicación o, en el caso que considero, la ecuación de Schrödinger. El punto de vista de Hendry, siguiendo a Nancy Cartwright, era que lo que explica no son teorías o leyes fundamentales, sino modelos científicos. Desde luego, esto representa otra versión del naturalismo. Nancy Cartwright ha defendido la opinión de que son modelos, y no teorías científicas, lo que se usa en la práctica científica para dar explicaciones de los fenómenos naturales (Cartwright, 1983).

Para vincular lo anterior con mi tema principal, digo que mi enfoque normativo ha sido afirmar que la teoría fundamental lo explica todo. Hendry se opuso a esta afirmación invocando el naturalismo del corte de Cartwright, que nos exigía examinar con cuidado de qué manera se usan los modelos. Como bien señala Cartwright, a menudo son modelos aquello a lo que recurren los científicos, antes que a teorías de alto nivel. Desde el punto de vista normativo basado en la teoría, hay sin duda una deficiencia en la manera de utilizar la aproximación orbital en muchas áreas de la química e incluso en física aplicada. Sin embargo, desde la perspectiva de lo que llamaré el naturalismo de Cartwright y Hendry, no puede culparse a los científicos que consideran los orbitales de manera realista, dado el papel central de los modelos en la ciencia moderna. No acepté sin dificultad esta crítica cuando Hendry puso en circulación su manuscrito, pero recientes avances en mi trabajo me han convencido de que su argumento era muy valioso (Hendry, 1994).

Además, algunos profesores de química han reaccionado a mi trabajo diciendo que los orbitales llegaron para quedarse, y por muchos que sean los cuestionamientos escrupulosos de su existencia física, no tendrán la más mínima repercusión en su empleo para la enseñanza de la química (Richman, 1999a, 1999b; Emerson, 1999). Desde luego, nunca propuse que deberíamos prescindir de los orbitales, sino que deberíamos señalar con más cuidado sus limitaciones en el proceso de enseñanza de la química.[6] Desde el punto de vista filosófico, la intención era examinar objetivamente el estatus teórico de orbitales y configuraciones electrónicas desde la perspectiva de la mecánica cuántica.

En cierta ocasión más adelante, mientras dictaba una conferencia de filosofía de la química hace algunos años, se me ocurrió la idea de que es bastante adecuado no sólo que los químicos y profesores de química usen los orbitales, sino que lo hagan de manera realista sin importar su estatus según la teoría fundamental de la mecánica cuántica. Creo

que en ese momento comprendí cabalmente la situación en verdad paradójica de que la química, aun siendo una ciencia autónoma, al mismo tiempo descansa en la física fundamental. Estas dos posturas no tienen que considerarse contradictorias, como tampoco tienen que parecerlo el punto de vista normativo y el "naturalizado".

En 1997 conocí a Bernadette Bensaude, la famosa filósofa francesa de la ciencia cuyo trabajo se inspira en la historia de la química. Iniciamos una conversación sobre Paneth y su concepción de los elementos, que es el tema de uno de los ensayos clásicos de filosofía de la química, escrito en alemán y traducido por su hijo Heinz Post (Paneth, 1962).[7] La esencia del ensayo de Paneth es que el químico debe adoptar una postura intermedia entre la perspectiva totalmente reduccionista que la mecánica cuántica ofrece y una ingenuamente realista que se detenga en colores, olores y otras propiedades semejantes de la química macroscópica. En este ensayo Paneth se interesa por el modo de considerar los elementos, y defiende un punto de vista dual de ellos como "sustancias básicas" inobservables, por un lado, y como "sustancias simples" observables, por el otro. Esto, afirma, resuelve un gran enigma acerca de la comprensión filosófica de la sustancia, a saber, cómo sobrevive un elemento en los compuestos, aunque las propiedades del compuesto parezcan guardar muy poca semejanza con las del elemento.

Propongo que éste es un modo de ver la relación entre la concepción normativa, o lo que la mecánica cuántica dice de la química, y la concepción más naturalista que procura tener en cuenta cómo los químicos y profesores de química consideran en realidad los conceptos y modelos químicos. Aunque parezca paradójico abrazar ambas posiciones a la vez, quizás uno podría acordar más fácilmente con la perspectiva de Paneth de una posición intermedia. Sin embargo, contra la actitud conciliatoria de Paneth, insisto en que deben adoptarse ambas posiciones al mismo tiempo. Reconocidamente, la paradoja tiene una larga historia en el pensamiento occidental. Una paradoja suele considerarse un problema serio que debe combatirse y vencerse a toda costa. Resulta interesante que en el pensamiento oriental, sobre todo en la filosofía china, las paradojas no sean dilemas serios que hayan de resolverse. Antes bien, una paradoja ha de aceptarse por lo que es. Es en este sentido un tanto esotérico en el que propongo que se consideren paradójicos, por una parte, la reducción de la química y, por la otra, el uso continuo de conceptos reducidos.[8]

En los años sesenta y setenta, Kuhn y otros mostraron a los filósofos de la ciencia que era inútil insistir en una visión normativa de teorías científicas que no guardaban mucha relación con el desarrollo histórico de la ciencia real. De manera similar, el ejemplo de los orbitales atómicos, en el que sigo centrándome, nos demuestra que es en cierto modo estéril insistir tan sólo en la visión normativa a partir de la mecánica cuántica. Es necesario considerar también lo que se hace realmente en química y el hecho de que los químicos se las ingenian muy bien pensando en los orbitales como objetos reales. De hecho necesitamos ambas visiones, la normativa y la descriptiva. Sin la recomendación normativa los orbitales se usan de manera demasiado ingenua, como ocurre con muchos profesores de química, que los emplean sin tener la más remota idea de que no son, en rigor, otra cosa que ficciones matemáticas. Mi trabajo anterior no habrá sido en vano si,

como espero, he logrado convencer a algunos de quienes se dedican a la enseñanza de la química de tener un poco más de cuidado en hasta dónde llevar una explicación basada en orbitales.

Ahora una generalización: creo que sigue siendo de gran utilidad cuestionar el estatus de la aproximación de los orbitales aunque se termine volviendo a usarlos de manera realista en química. Esto se debe a que el cuestionamiento mejora enormemente la aproximación.[9]

Hay otra área en la filosofía de la química en la que desde el comienzo de mi trabajo he llamado a la adopción de un enfoque naturalista. Se refiere a la cuestión de la reducción de la química a la física o, más específicamente, a la mecánica cuántica o a la mecánica cuántica relativista si se insiste en ser muy preciso.

Ya en la reunión de la Asociación para la Filosofía de la Ciencia de 1994 en Nueva Orleans propuse que la reducción de la química no debería considerarse de la manera clásica, consistente en tratar de relacionar las teorías de la química con las de la física, ni en el sentido formal de buscar principios puente (Scerri, 1994). El problema de este enfoque de Nagel es que requiere versiones axiomatizadas de la teoría que se ha de reducir, así como de la teoría reductora. Y aunque se puede argumentar a favor de la existencia de una axiomática mecanocuántica, sin duda no puede decirse lo mismo de la química, ya que no hay una axiomática de la teoría de esta disciplina.[10]

Sin embargo, mi principal motivo para propugnar un enfoque naturalista era que los propios científicos enfocaban de manera totalmente distinta la pregunta de si la química se ha reducido a la física. En vez de considerar un enfoque formal que vinculara las teorías de ambas disciplinas, un científico intentaba examinar hasta qué grado los valores numéricos de conceptos químicamente importantes como ángulos de enlace, momentos dipolares y nociones parecidas pueden inferirse de los primeros principios de la teoría reductora o de la mecánica cuántica. Una pregunta más desafiante para la teoría es si la liquidez del agua, por ejemplo, puede predecirse a partir de los primeros principios. Es de suponer que esto seguirá siendo inalcanzable durante algún tiempo o aun que nunca se consiga. Antes que buscar una relación entre las teorías, el enfoque naturalista de la pregunta de la reducción de la química debería examinar la relación entre las propiedades químicas, por un lado, y la teoría reductora, por el otro.

Desde luego, la esperanza es ir más allá de datos como longitudes de enlace o momentos dipolares y ser capaces de calcular la factibilidad o la velocidad de cualquier reacción en particular, a partir de los primeros principios, sin tener que realizar siquiera un experimento. Cabe señalar que se ha logrado un progreso considerable en el enfoque teórico cuántico de las velocidades de reacción, aunque los resultados más precisos se han limitado, no es de extrañar, a reacciones como la de átomos de hidrógeno con moléculas del mismo elemento.

Desde que hice esta propuesta he encontrado muchos ejemplos de filósofos que sugieren precisamente este enfoque más naturalista y pragmático de la reducción, consistente en seguir lo que hacen los químicos y físicos computacionales (Suppes, 1978; Popper, 1982; Hacking, 1996). Para recapitular, mientras que los filósofos antes veían la reducción como una relación entre teorías, el enfoque naturalista que defiendo consiste en aceptar el enfoque científico de la reducción de una rama de la ciencia a otra, pero sin sacrificar el rigor filosófico en el análisis de los procedimientos usados. Sostengo que, de hecho, lo que comienza como naturalismo puede convertirse en hacer recomendaciones normativas específicas a los profesionales de campos como la química cuántica

computacional (Scerri, 1992a, 1992b, 1998a, 1998b). Lo que descubrí fue que, en muchos casos de la química cuántica computacional, los químicos sostenían la posibilidad de deducir en rigor hechos químicos a partir de la ecuación de Schrödinger. Sin embargo, tales prácticas con frecuencia involucraban procedimientos semiempíricos, como el uso de un conjunto de orbitales que funcionan en otros cálculos, o el uso de cálculos que no logran estimar márgenes de error rigurosos (Scerri, 1997). No entraré aquí en mayores detalles técnicos, pero quiero señalar que éste es un ejemplo de movimiento en la dirección opuesta. Lo que empieza como un proyecto naturalista o descriptivo termina haciendo recomendaciones normativas.[11]

CONCLUSIÓN

Propongo que el punto de vista normativo sobre el estatus de los orbitales según la mecánica cuántica y la adopción de una visión realista de los mismos pueden coexistir felizmente. Sostengo que éste es un ejemplo de la coexistencia de los enfoques normativo y naturalista en la filosofía de la ciencia. Esta proposición sólo parece contradictoria si se mantiene el habitual punto de vista estático de defender las posturas filosóficas. En tiempos recientes los filósofos han dado señales de haberse cansado de las interminables controversias sobre realismo y antirrealismo, pues se dan cuenta de que ambas posiciones muestran muchas virtudes. Arthur Fine ha acuñado la expresión "actitud ontológica natural" (Fine, 1986). Según mi interpretación, la parte importante de esta noción reside en la elección de la palabra "actitud" sobre "postura", y aunque Fine en realidad no ha hecho distinción alguna entre los términos, sus artículos apuntan en esta dirección. Lo que a mi parecer sugiere Fine es que ya no debemos concebir la discusión como una disyuntiva entre realismo y antirrealismo, sino que convendría que los científicos adoptaran una u otra posición en distintos momentos y, en ocasiones, ambas a la vez. Se trata, entonces, no tanto de posiciones que sustenten los científicos y filósofos, sino de adoptar actitudes más temporales, más dinámicas.

Creo que lo anterior representa un paso adelante en el proceso por el que he venido abogando en este trabajo. La naturaleza de la química, quizá más que la de la física o la biología, podría servir de modelo para el enfoque filosófico basado en "actitudes" y no en posturas inflexibles que comúnmente se espera que mantengamos y defendamos a toda costa. Esto parece tanto más adecuado cuanto que la química, como bien saben quienes la ejercen y la enseñan, nos exige operar en muchos niveles simultáneamente. Esto exige la adopción de varias actitudes. Para mostrarles lo que tengo en la mente, quisiera terminar con una cita de una obra del profesor de química sudafricano Michael Laing:

> La dificultad surge porque enseñamos la química simultáneamente en cuatro niveles distintos.
>
> Las realidades del agua:
>
> Nivel 1: macroscópico: sensible (táctil, gustable, húmeda al tacto).
>
> Nivel 2: comunicativo: lenguaje, nombre: *a*) oral y auditivo, la palabra, el sonido que se asigna a algo que puede verse y sentirse, y *b*) la versión escrita.
>
> Nivel 3: simbólico, representativo: fórmula elemental. Éste llegó una vez que los químicos entendieron los conceptos de elementos, átomo, equivalencia, valencia, estequiometría, a partir de 1800 y hasta 1860, como se confirmó en la conferencia de Karlsruhe. El agua líquida se convierte entonces en H_2O, con una masa molecular relativa de 18 unidades. Los cálculos numéricos se vuelven importantes.
>
> Nivel 4: modelo atómico a gran escala. Esta representación muestra la forma y el tamaño relativo de la molécula, cuyo tamaño real es tan pequeño que la persona media no alcanza a comprenderlo […].
>
> Para apreciar el agua como lo hace un químico hay que usar los cuatro niveles conceptuales y ser capaz de cambiar de uno a otro según corresponda [Laing, 1999].

La química es un nuevo campo fértil en el que la filosofía de la ciencia podría

investigar más la cuestión de los enfoques normativo y naturalista o la pregunta de si los científicos realmente adoptan posturas filosóficas del modo en que usan e interpretan teorías científicas. En mi sentir, los químicos en particular tienden a adoptar distintas "actitudes", para usar el término de Fine, dependiendo del nivel en el que estén operando.

BIBLIOGRAFÍA

Bhushan, N., y S. Rosenfeld, *Of Minds and Molecules*, Oxford University Press, Nueva York, 2000.

Brakel, J. van, *Philosophy of Chemistry*, Leuven University Press, Lovaina, 2000.

Capra, F., *The Tao of Physics*, Fontana, Londres, 1976.

Cartwright, N., *How the Laws of Physics Lie*, Oxford University Press, Oxford, 1983.

Doppelt, G., "The Naturalist Conception of Methodological Standards in Science", *Philosophy of Science*, núm. 57, 1990, pp. 1-19.

Dretske, F., *Knowledge and the Flow of Information*, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1981.

Emerson, K., "The Quantum Mechanical Explanation of the Periodic System", *Journal of Chemical Education*, núm. 76, 1999, p. 1189.

Fine, A., *The Shaky Game*, Chicago University Press, Chicago, 1986.

Gettier, E., "Is Justified True Belief Knowledge?", *Analysis*, núm. 23, 1963, pp. 121-123.

Giere, R. N., "Philosophy of Science Naturalized", *Philosophy of Science*, núm. 52, 1985, pp. 331-356.

———, "Scientific Rationality as Instrumental Rationality", *Studies in History and Philosophy of Science*, núm. 20, 1989, pp. 377-384.

Goldman, A. I., *Liaisons: Philosophy Meets the Cognitive and Social Sciences*, mit Press, Cambridge, Massachusetts, 1992.

Hacking, I., "The Disunity of Science", en P. Galison y D. J. Stump (eds.), *Disunity of Science: Boundaries, Contexts, and Power*, Stanford University Press, Stanford, California, 1996.

Hendry, R. F., manuscrito sin publicar, 1994.

Hettema, T., y A. F. Kuipers, "The Periodic Table – Its Formalization, Status and Relationship to Atomic Theory", *Erkenntnis*, núm. 28, 1988, pp. 841-860.

Kitcher, P., "The Naturalist Returns", *The Philosophical Review*, núm. 101, 1992, pp. 53-114.

Laing, M., "The Four-Fold Way", *Education in Chemistry*, vol. 36, núm. 1, 1999, pp. 11-13.

Latour, B., y S. Woolgar, *Laboratory Life: The Social Construction of Scientific Facts*, Sage Publications, Los Ángeles, 1979.

Laudan, L., "Progress of Rationality? The Prospects for Normative Naturalism", *American Philosophical Quarterly*, núm. 24, 1987, pp. 19-31.

———, "Normative Naturalism", *Philosophy of Science*, núm. 57, 1990, pp. 44-59.

Lombardi, O., y M. Labarca, "The Ontological Autonomy of the Chemical World", *Foundations of Chemistry*, vol. 7, núm. 2, 2005, pp. 125-148.

Needham, P., "Reduction and Abduction in Chemistry, A Response to Scerri", *International Studies in the Philosophy of Science*, núm. 13, 1999, pp. 169-184.

———, "Reduction in Chemistry – A Second Response to Scerri", *International Studies in the Philosophy of Science*, núm. 14, 2000, pp. 317-323.

Paneth, F. A., "The Epistemological Status of the Concept of Element", *British Journal for the Philosophy of Science*, núm. 13, 1962, pp. 1-14, 144-160; reimpr. en *Foundations of Chemistry*, núm. 5, 2003, pp. 113-145.

Popper, K. R., "Scientific Reduction and the Essential Incompleteness of All Science", en F. L. Ayala y T. Dobzhansky (eds.), *Studies in the Philosophy of Biology*, University of California Press, Berkeley,

California, 1982, pp. 259-284.

Quine, W. V. O., “Two Dogmas of Empiricism”, *Philosophical Review*, núm. 60, 1951, pp. 20-43.

Richman, R. M., “In Defence of Quantum Numbers”, *Journal of Chemical Education*, núm. 76, 1999(a), p. 608.

———, “The Use of One-Electron Quantum Numbers to Describe Polyatomic Systems”, *Foundations of Chemistry*, núm. 1, 1999(b), pp. 175-183.

Ruthenberg, K., “Friedrich Adolf Paneth (1887-1958)”, *Hyle*, núm. 3, 1997, pp. 103-106.

Scerri, E. R., “Eastern Mysticism and the Alleged Parallels with Physics”, *American Journal of Physics*, núm. 57, 1989, pp. 687-692.

———, “Electronic Configurations, Quantum Mechanics and Reduction”, *British Journal for the Philosophy of Science*, núm. 42, 1991, pp. 309-325.

———, “Quantum Chemistry Truth”, *Chemistry in Britain*, vol. 28, núm. 4, 1992(a), p. 326.

———, “Quantum Extrapolation”, *Chemistry in Britain*, vol. 28, núm. 9, 1992(b), p. 781.

———, “Has Chemistry Been at Least Approximately Reduced to Quantum Mechanics?”, en D. Hull, M. Forbes y R. Burian (eds.), *Proceedings of the Philosophy of Science Association*, vol. 1, Asociación para la Filosofía de la Ciencia, East Lansing, Michigan, 1994, pp. 160-170.

———, “Has the Periodic Table Been Successfully Axiomatized?”, *Erkenntnis*, núm. 47, 1997, pp. 229-243.

———, “How Good is the Quantum Mechanical Explanation of the Periodic System?”, *Journal of Chemical Education*, núm. 75, 1998(a), pp. 1384-1385.

———, “Popper’s Naturalized Approach to the Reduction of Chemistry”, *International Studies in the Philosophy of Science*, núm. 12, 1998(b), pp. 33-44.

Scerri, E. R., “Response to Needham”, *International Studies in the Philosophy of Science*, núm. 13, 1999, pp. 185-192.

———, “Second Response to Needham”, *International Studies in the Philosophy of Science*, núm. 14, 2000(a), pp. 307-316.

———, “Have Orbitals Really Been Observed?”, *Journal of Chemical Education*, núm. 77, 2000(b), pp. 1492-1494.

———, “The Recently Claimed Observation of Atomic Orbitals and Some Related Philosophical Issues”, *Philosophy of Science*, núm. 68, 2001, pp. S76-S88.

———, “Philosophical Confusion in Chemical Education”, *Journal of Chemical Education*, núm. 80, 2003, pp. 468-474.

Siegel, H., “What is the Question Concerning the Rationality of Science?”, *Philosophy of Science*, núm. 52, 1985, pp. 517-537.

———, “Philosophy of Science Naturalized? Some Problems with Giere’s Naturalism”, *Studies in History and Philosophy of Science*, núm. 20, 1989, pp. 365-375.

———, “Laudan’s Normative Naturalism”, *Studies in History and Philosophy of Science*, núm. 21, 1990, pp. 295-313.

Solomon, M., “Legend Naturalism and Scientific Progress: An Essay on Philip Kitcher’s *The Advancement of Science”, Studies in History and Philosophy of Science*, núm. 26, 1995, pp. 205-218.

Suppes, P., “The Plurality of Science”, en P. D. Asquith e I. Hacking (eds.), *Proceedings of the Philosophy of Science Association*, vol. 2, Asociación para la Filosofía de la Ciencia, East Lansing, Michigan, 1978, pp. 3-16.

Zukav, G., *The Dancing Wu-Li Masters*, Fontana-Collins, Londres, 1979.

---

[*] Departamento de Química y Bioquímica, Universidad de California en Los Ángeles, 405 Hilgard Avenue, Los Ángeles, CA 90095-1569. Dirección electrónica: scerri@chem.ucla.edu

[1] El término “naturalismo” tiene diversas acepciones. Por ejemplo, en la filosofía de las ciencias sociales a veces se entiende como positivismo. No es en este sentido como se usa “naturalismo” en el presente artículo. Aquí no me refiero a un enfoque empírico de la ciencia social, sino a una forma de naturalismo que implica centrar el interés en el aparato, las técnicas y los supuestos de las ciencias naturales.

[2] Doy las gracias a Martin Curd, de la Universidad Purdue, por la discusión de este punto.

[3] Actualmente se da una situación análoga en la investigación en educación en química, donde casi todos los esfuerzos se dirigen al proceso de aprendizaje y prácticamente ninguno al contenido de los cursos de química (Scerri, 2003).

[4] Incluso los sociólogos de la ciencia parecen haber pasado por alto la química, con la posible excepción del libro de Bruno Latour *Laboratory Life*, que se basa en observaciones realizadas en un laboratorio bioquímico (Latour y Woolgar, 1979).

[5] El artículo en cuestión es Scerri, 1991.

[6] Además, contra lo que Hendry afirmaba en su artículo, yo no defendía el uso de formas más rigurosas de química cuántica para la química en general.

[7] Véase la breve biografía de Paneth escrita por Ruthenberg (Ruthenberg, 1997).

[8] De sobra está decir que no soy partidario de los paralelos entre la ciencia moderna y el misticismo oriental popularizados por autores como Capra y Zukav (Capra, 1976; Zukav, 1979). Por ejemplo, véase mi crítica de los supuestos paralelos entre el misticismo oriental y la física moderna publicados en el *American Journal of Physics* (Scerri, 1989).

[9] Un reciente artículo de Lombardi y Labarca analiza mi postura ante el estatus de los orbitales atómicos y desarrolla mi punto de vista (Lombardi y Labarca, 2005).

[10] Esto no ha impedido a los filósofos tratar de axiomatizar ciertas partes de la química, como, por ejemplo, el sistema periódico de los elementos (Hettema y Kuipers, 1988). Véase también una crítica de estos intentos en Scerri, 1997.

[11] Quisiera agregar que Paul Needham ha hecho una crítica detallada de mi punto de vista sobre la reducción de la química en un debate entre nosotros, publicado en varios números del *International Studies in the Philosophy of Science* (Scerri, 1998b; Needham, 1999; Scerri, 1999; Needham, 2000; Scerri, 2000a).

VII. CÓMO FALLAN LOS MODELOS CLÁSICOS DE EXPLICACIÓN EN EL ABORDAJE DE LA QUÍMICA

El caso de la modelización molecular

JOHANNES HUNGER[*]

> Hablamos de "explicación", pero sólo la "descripción" nos distingue de los grados anteriores del conocimiento y de la ciencia. Describimos mejor, pero explicamos tan poco como nuestros predecesores. Hemos descubierto una sucesión múltiple donde el hombre ingenuo y curioso de culturas antiguas no veía más que dos cosas: "causa" y "efecto", como se decía; hemos perfeccionado la concepción del devenir, pero no hemos averiguado lo que hay detrás ni más allá de la concepción. La serie de "causas" está en todo caso mucho más completa ante nosotros; concluimos que esto y aquello deben anteceder para que lo de más allá pueda seguir, pero nada hemos comprendido con ello. La peculiaridad de todo proceso químico, por ejemplo, parece un "milagro", igual que antes, y lo mismo toda locomoción; nadie ha "explicado" el impulso. ¿Cómo íbamos a poder hacerlo? Operamos con puras cosas que no existen, con líneas, superficies, cuerpos, átomos, tiempos divisibles, espacios divisibles: ¿cómo va a ser posible la explicación, si empezamos haciendo de todo una concepción, nuestra concepción?

¿Cómo podremos explicar? Ésta es una pregunta que ha preocupado a los filósofos de la ciencia durante al menos seis décadas. Como se puede ver en la cita que antecede, tomada del tercer libro de *La gaya ciencia* de Nietzsche, es también una pregunta de gran importancia metafísica. ¿Qué se requiere para que una explicación sea válida? ¿Y qué distingue una explicación de una simple descripción? Curiosamente, la cita de Nietzsche muy bien habría podido salir de la obra de uno de los fundadores de la filosofía moderna de la ciencia, el físico católico Pierre Duhem. Sin embargo, mientras que Nietzsche se proponía desacreditar a la metafísica por su incapacidad para producir explicaciones válidas, la intención de Duhem era diametralmente opuesta: excluir las pretensiones explicativas del quehacer de la ciencia y dejarlas por entero a la metafísica; porque "si las teorías físicas tienen por objeto explicar las leyes experimentales, la física teórica no es una ciencia autónoma; está subordinada a la metafísica" (Duhem, 1991, p. 19).

Por tanto, si queremos hablar, según y conforme a Duhem, sobre la explicación en la ciencia, a lo que nos referimos propiamente es a la "descripción" y al problema correspondiente de establecer criterios para discriminar las descripciones inadecuadas de las adecuadas. ¿Qué puede entonces decirnos la filosofía de la ciencia sobre el concepto de explicación científica? ¿Tiene ésta que excluirse de la ciencia, como exige Duhem, para que no quede sino el problema de encontrar buenas descripciones? ¿O podría la filosofía de la ciencia, en cuanto disciplina de la filosofía, respondiendo al desafío de Nietzsche de ir "detrás de la imagen de la ciencia",[1] esforzarse por establecer una concepción autónoma de explicación, un concepto que, como idea platónica, lleve la explicación a una distancia eterna de su objeto al tiempo que trasciende el alcance de preguntas realistas, científico-empíricas, *de facto*, hacia una legitimación *de iure*? En este capítulo sigo la intuición de que la filosofía de la ciencia no puede librarse del intento de colocarse en el centro, "dentro del cuadro" de aquello que trata de comprender. Aunque hay a primera vista suficientes razones a favor de esta intuición, la filosofía de la ciencia, conforme a sus propias normas, sólo puede mantener su posición "dentro del cuadro"

dando *buenas* descripciones de cómo usan realmente los científicos el término "explicación" y qué hacen en verdad cuando explican.

Llama la atención que el diagnóstico de Nietzsche siga siendo de interés: mientras que los filósofos de la ciencia de las últimas décadas poblaron densamente los cuadros de la física y la biología analizando en detalle sus prácticas científicas —a veces se les encontraba incluso en los laboratorios—, no mostraron mucho interés en pintar un cuadro apropiado de la *química*. A este respecto, el propósito del ensayo es negativo: trataré de convencer al lector de que los modelos filosóficos de explicación científica, al menos los más populares, dejan en su mayoría *inexplicadas* las explicaciones químicas. No pueden abordar, en particular, las explicaciones que la química moderna ofrece de lo que Nietzsche llamaba "modos del devenir químico", esto es, por qué las moléculas *devienen* como lo hacen, por qué *presentan el aspecto* con que las observamos experimentalmente o, para decirlo con más precisión, por qué poseen cierta *estructura molecular*. Ésta es la parte positiva del ensayo: presento primeramente los principios y aspectos fundamentales de tres modelos distintos con que los químicos describen hoy las estructuras moleculares; en segundo lugar examino cómo evalúan realmente los químicos la capacidad explicativa asociada a estos modelos.

El presente estudio no pretende en modo alguno ser completo. Intenta más bien abarcar un amplio espectro de métodos disponibles discutiendo tres puntos representativos: el primero se sitúa en el extremo no teórico del espectro. Es el método de usar un algoritmo de la inteligencia artificial, la "simulación de redes neuronales", para predecir correctamente la estructura secundaria de las proteínas. Es un punto interesante porque resulta ser el único modelo en que el resultado obtenido al aplicar descripciones filosóficas de la explicación científica concuerda con la manera como los científicos evalúan su virtud explicativa. El segundo punto está situado aproximadamente en la parte media. No es una simple heurística, pero no cumple con normas teóricas fundamentales; es el modelo de la "mecánica molecular" o de los "campos de fuerza"; cuando se refieren a él, los químicos hablan de métodos "empíricos". El tercer punto del espectro se encuentra en su extremo "teórico". Es el modelo *ab initio*, que trata de aplicar, en la medida de lo posible, los principios teóricos más básicos de lo que mantiene a los átomos unidos en moléculas, esto es, los principios de la química cuántica.

La estructura del capítulo es en cierto modo hegeliana: primero se discuten los tres métodos de modelización molecular mencionados. Luego introduzco dos importantes modelos de explicación científica: el "nomológico deductivo" y el "causal". En síntesis, fusiono estas dos primeras partes aplicando cada uno de los modelos de explicación a cada uno de los métodos de modelización molecular descritos. El resultado es negativo: aparte del modelo de redes neuronales, el diagnóstico que se obtiene aplicando los modelos filosóficos no concuerda con la evaluación de la capacidad explicativa de la que se da cuenta en la primera parte. Por último, ofrezco algunos comentarios constructivos, aunque esquemáticos, sobre el aspecto que una mejor descripción filosófica de la explicación tendría en la ciencia, *incluida* la química.

EN EL CUADRO DE LA QUÍMICA: EXPLICACIÓN DE LAS ESTRUCTURAS MOLECULARES

La *estructura* de una molécula, independientemente de su representación, es uno de los conceptos más importantes en química. Por lo general se refiere a la disposición tridimensional de los constituyentes de la molécula en el espacio, mientras que a las distintas disposiciones que una misma molécula puede adoptar se les llama conformaciones. El espacio que abarcan los parámetros estructurales necesarios para describir cabalmente una molécula se llama espacio conformacional. Saber qué áreas del espacio conformacional están ocupadas y a qué regularidades obedece el modo en que se ocupan es decisivo para el entendimiento de la reactividad química de una molécula.

El famoso principio de "llave y cerradura" es tan sólo uno de los muchos ejemplos: manifiesta que la extraordinaria selectividad que se observa en las reacciones enzimáticas se explica por una correspondencia *geométrica* perfecta entre la forma estructural de la enzima y la forma de una molécula receptora; pero, antes que nada, ¿cómo se explica la geometría de una molécula, o sea, su estructura? Desde luego, la concepción de una estructura estática es demasiado simplista. En realidad, los átomos de una molécula, incluso en estado sólido y a temperaturas cercanas a los 0 K, se encuentran en constante movimiento vibratorio y rotatorio. Lo que damos por sobrentendido al hablar de la "estructura" de una molécula es, por tanto, una disposición tridimensional *estable* de los átomos, es decir, una *conformación* estable de la molécula. Es aquí donde entra la termodinámica: *estable*, según la definición termodinámica, es una disposición que corresponde a la mínima energía libre. Dejando a un lado el término "entropía", esta energía libre se refiere a la que resulta de las interacciones de los átomos y sus constituyentes. Suponiendo que pudiéramos describir correctamente estas interacciones, la manera de encontrar las conformaciones estables es buscar disposiciones atómicas que constituyan un mínimo sobre la superficie de energía: una superficie multidimensional que describe la energía libre de una molécula como función de las coordenadas tridimensionales de sus átomos. El concepto de hipersuperficie de energía es medular en la mayoría de los métodos de modelización molecular que los químicos emplean hoy para modelizar la estructura de una molécula.

Ab initio es una expresión eufemística usada para describir un método destinado a empezar, si no por el principio, sí lo más cerca posible de él; pero ¿dónde está el principio? Por lo que hace a la física cuántica, al principio está la ecuación de Schrödinger. La química cuántica tiene que ser más modesta. No puede *comenzar* siquiera sin supuestos fundamentales o, más bien, *simplificaciones*. He aquí otro eufemismo famoso: "Las leyes físicas fundamentales necesarias para la teoría matemática de gran parte de la física y de toda la química son, pues, completamente conocidas, y la *única dificultad* es que la aplicación exacta de dichas leyes da lugar a ecuaciones demasiado complicadas para ser resueltas" (Dirac, 1929, p. 714; las cursivas son mías).

Toda la empresa de la química cuántica, miríadas de *gigaflops* [mil millones de operaciones por segundo] en recursos computacionales durante décadas, se han dedicado a "la única dificultad" de Dirac. Los físicos y los químicos no sólo tienen distintos puntos de partida, sino que corren distintas carreras. A un físico teórico sencillamente no le importa que en todo el universo no haya una sola molécula a la cual pueda aplicarse el formalismo físico cuántico. En cambio, para la química, una disciplina eminentemente taxonómica, un modelo que no puede aplicarse a nada no es viable. "La única manera" en que podemos echar a andar la química cuántica es con un inmenso conjunto de aproximaciones y supuestos drásticos.

Sin embargo, lo anterior no hace de la química una disciplina más simple o menos realista que la física. Antes bien, resulta que una disciplina científica aumenta en complejidad en la medida en que es más realista. Es una "falacia de concreción mal aplicada", como dijo Whitehead (1929), pensar que las *primeras* cosas son las partículas elementales. Pueden serlo o no serlo en sentido ontológico. Histórica y epistemológicamente no lo son.

¿Qué se necesita entonces para resolver la ecuación de Schrödinger de un sistema de muchos cuerpos como una molécula? En primer lugar está la aproximación de Born-Oppenheimer-Huang: la masa de un núcleo atómico es unas 2 000 veces mayor que la de un electrón. Parece razonable suponer que, en relación con los electrones, los núcleos están fijos. Ahora bien, sólo nos interesa resolver la ecuación de Schrödinger de los electrones situados en un campo eléctrico procedente de un conjunto de núcleos fijos. Como Woolley *et al.* han subrayado (Woolley, 1985; Woolley y Sutcliffe, 1977), sólo a partir de este supuesto empieza a ser inteligible el concepto de estructura molecular. En consecuencia, uno de los puntos de partida de la química moderna no es un "concepto" deducido, sino uno que "se ajuste a mano" al marco químico cuántico (Woolley, 1985). Una estructura molecular estable corresponde a un mínimo sobre la hipersuperficie de Born-Oppenheimer, que da la energía del estado basal de los electrones de la molécula como función de las posiciones de los núcleos. Aun así, el problema es muy complejo. Incluso conforme a la aproximación de Born-Oppenheimer, la única *molécula* para la cual es posible hallar una solución exacta es la más simple, H_2^+. Por lo mismo, hay que

hacer más simplificaciones. A grandes rasgos, la estrategia consiste en dividir la función de onda de todo el sistema, Ψ, entre un producto de funciones de onda de cada electrón, Ψ_i, llamados “orbitales moleculares”. Como los electrones son fermiones y, por tanto, antisimétricos, a este producto se le llama determinante, en concreto *determinante de Slater*. Tiene la propiedad deseada de cambiar de signo si los electrones, esto es, los orbitales moleculares, se intercambian:

$$\Psi = \det(\Psi_1 \otimes \Psi_2 \otimes \cdots \otimes \Psi_n)$$

Cada uno de estos orbitales moleculares, Ψ_i, a su vez, se describe como una combinación lineal de funciones de base, φ_i. Ésta es la aproximación de la “combinación lineal de orbitales atómicos” (CLOA):

$$\Psi_i = \sum_{\mu=1}^{N} c_{\mu i} \cdot \phi_i$$

Qué aspecto tienen estos orbitales atómicos y cuántos de ellos se usan en un cálculo son preguntas empíricas limitadas por el tamaño del problema y la capacidad computacional disponible. En la práctica, los “orbitales de Slater”, que poseen una parte radial exponencial y son similares a los orbitales s, p, d y f del hidrógeno, y los orbitales de Gauss, que tienen una parte radial gaussiana, han adquirido popularidad. De manera similar a la división de la función de onda entre funciones de onda electrónicas individuales, Ψ_i, el operador hamiltoniano también se divide entre un operador electrónico individual, el operador de Hartree-Fock. Las correspondientes ecuaciones de Schrödinger son las siguientes:

$$\widehat{h}^{\mathrm{HF}} \cdot \Psi_i = \varepsilon_i \cdot \Psi_i \qquad 1, 2, 3, \ldots, N$$

donde $\widehat{h}$ es el operador de Hartree-Fock y ε_i es la energía del estado basal del electrón i.

Este operador trata a todo electrón descrito por la función de onda orbital molecular como si estuviera solo en el campo nuclear y sólo “ve” un campo efectivo de los otros electrones (compuesto de interacciones simples de Coulomb y de intercambio):

$$\widehat{h}^{\mathrm{HF}} = \widehat{h}_0 + \widehat{j} - \widehat{k}$$

Aquí $\widehat{h}$ es el operador hamiltoniano de un solo electrón en un campo de núcleos fijos, y $\widehat{j}$ y $\widehat{k}$ son los operadores de Fock y de Hartree que explican las interacciones de Coulomb y de intercambio entre los electrones. Esta simplificación se llama aproximación

de “partículas independientes”. Según el teorema variacional,

$$\frac{\partial E}{\partial c_i} = 0$$

toda posible solución al problema de Hartree-Fock tiene un valor de energía mayor que el de la solución exacta. El coeficiente *c* de la ecuación que antecede tiene que elegirse así de acuerdo con la condición

$$\frac{\partial E}{\partial c_1} = 0$$

donde *E* es el autovalor del estado basal de la ecuación de Schrödinger simplificada. El problema de tal enfoque es que para aplicar los operadores de interacción electrónica $\hat{j}$ y $\hat{k}$, las funciones de onda Ψ_i de los otros electrones tienen que ser ya conocidas. Sin embargo, para obtener estas funciones de onda hay que resolver las correspondientes ecuaciones de Schrödinger de cada electrón:

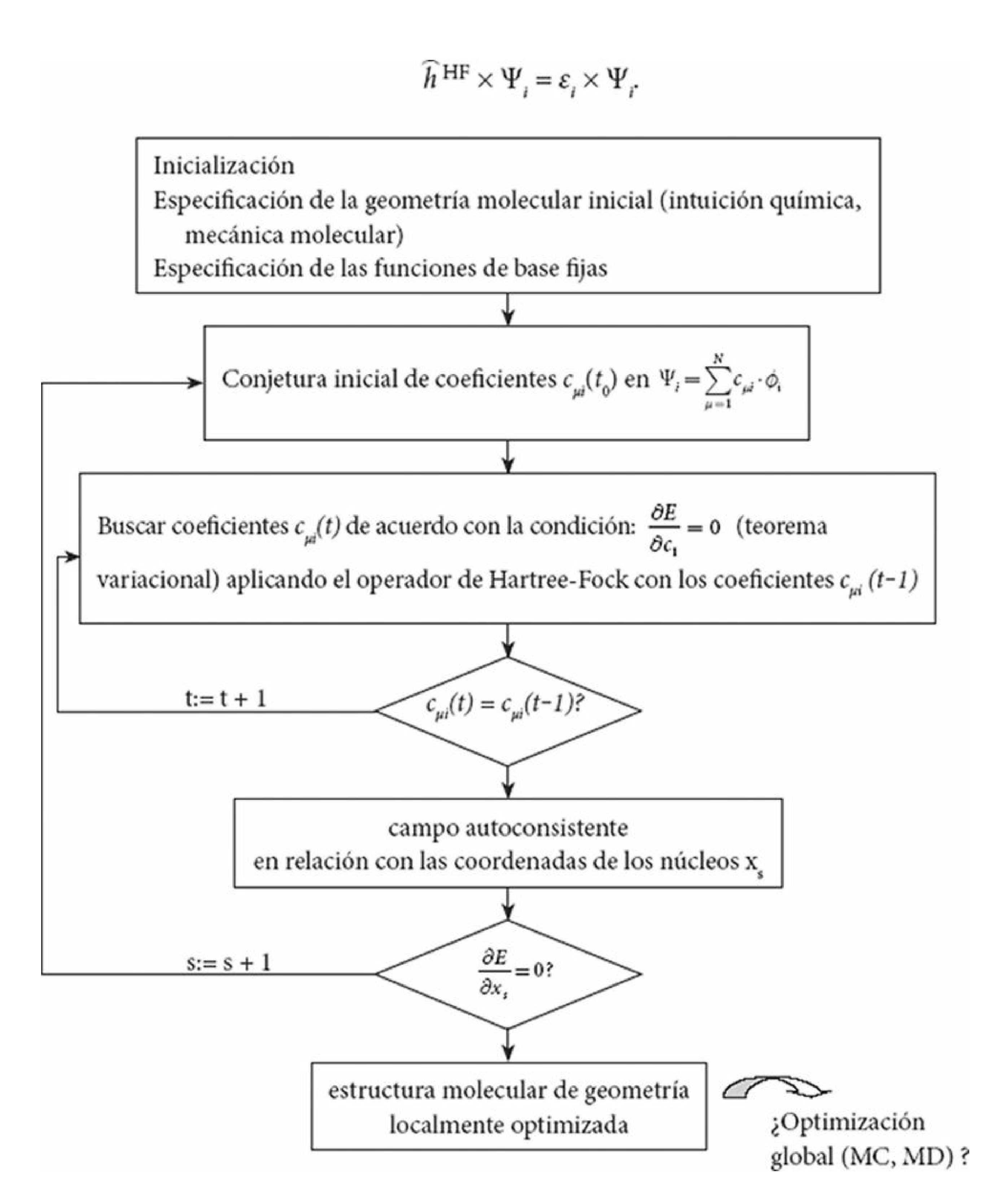


FIGURA VII.1. *Diagrama de flujo del algoritmo* ab initio.

El operador de Hartree-Fock es, pues, *circular*. Sus partes de interacción electrónica dependen de sus propios resultados. Para superar esta circularidad hay que empezar con algunas conjeturas iniciales de las funciones de onda y resolver las ecuaciones

correspondientes de manera iterativa. Así, el resultado de las funciones de onda, dado por valores específicos de los coeficientes c, en cierta etapa t_0, se emplea para resolver las ecuaciones usando los coeficientes $c(t_0)$ para obtener nuevos coeficientes, $c(t_1)$. Con estos últimos se obtiene otro conjunto más de coeficientes, $c(t_2)$. Todo el procedimiento se repite hasta que no ocurren cambios significativos. El campo surgido de los electrones es *coherente consigo mismo* (de ahí que este procedimiento se llame método del *campo autoconsistente);* pero todavía no terminamos. El valor propio de energía que se obtiene como resultado de todo el procedimiento corresponde a un solo punto sobre la superficie de Born-Oppenheimer. Este punto está dado por la disposición tridimensional de los núcleos, que tuvo que especificarse por anticipado y que se consideró fija durante el cálculo del campo autoconsistente. Para encontrar una disposición *estable* de los núcleos, ahora hay que cambiar estas coordenadas en una iteración superpuesta de descenso de máxima pendiente. Esto es, hay que cambiarlas de tal manera que, en relación con el punto de partida, se alcance el siguiente mínimo local en la superficie de Born-Oppenheimer.

La figura VII.1 resume este procedimiento de optimización geométrica basado en un cálculo de Hartree-Fock. Nótese que para cada paso del descenso de máxima pendiente hay que repetir todo el proceso de Hartree-Fock. El esfuerzo computacional requerido es, pues, enorme, y dicha optimización de geometría local es lo más que puede lograrse mediante cálculos *ab initio*. Al mismo tiempo, esto implica que el resultado de un cálculo *ab initio* depende mucho de la geometría especificada al principio. La conjetura apropiada de estas posiciones de inicio suele tomarse de la experimentación.[2] Aunque este hecho pueda contravenir el sentido de la expresión *ab initio*, incluso los proponentes del método lo admiten sin reserva. Así lo expresan Hehre, Radom, Schleyer y Pople, los autores de la "biblia" del modelo *ab initio*, la *Ab initio Molecular Orbital Theory*: "El método más simple y menos laborioso a fin de obtener estructuras geométricas idóneas para realizar cálculos es suponer los valores de todas las longitudes y ángulos de enlace. Un recurso es usar datos estructurales experimentales[…]" (Hehre *et al.*, 1986, p. 92).

Siempre que no se disponga de una geometría inicial apropiada, los autores recomiendan apartarse del todo de la optimización geométrica. Otro problema se deriva del hecho de que el esfuerzo computacional necesario para resolver la ecuación de Hartree-Fock aumenta a la cuarta potencia el número de funciones de base usadas en la CLOA. Este número aumenta drásticamente con cada nuevo electrón que debe considerarse en el sistema. En consecuencia, los cálculos *ab initio* se limitan a la modelización de moléculas relativamente pequeñas.[3] Ni la mayoría de las biomoléculas, como las proteínas, ni un gran número de moléculas inorgánicas que contienen átomos pesados pueden tratarse con el enfoque químico cuántico. Dentro de este alcance limitado, sin embargo, el modelo *ab initio* se aplica con mucho éxito. No sólo se emplea para el cálculo de estructuras moleculares, sino que es capaz de reproducir y predecir propiedades electrónicas (valores propios de energía de estados basales y excitados), valores espectroscópicos, procesos de formación y ruptura de enlaces, trayectorias de reacción y muchos otros con un alto grado de precisión. Como lo indica la expresión *ab*

initio, el cálculo comienza "desde los primeros principios". Dejando a un lado coordenadas y coeficientes iniciales, los únicos datos que es necesario ingresar para un cálculo *ab initio* son el espín, la carga y la masa de las partículas elementales de la molécula que se considera. Los químicos teóricos elogian este método por su rigor teórico y explicativo. Primas, un químico cuántico y antirreduccionista por lo regular bastante escéptico, escribe:

> La química cuántica es *la* teoría fundamental de las moléculas; permite una descripción *integral* y *correcta* de la estructura y las propiedades de moléculas discretas. En principio, todas las propiedades medibles de manera experimental se podrían calcular matemáticamente aplicando el formalismo químico cuántico; por lo mismo, los únicos parámetros empíricos son la constante de Planck, la velocidad de la luz, las masas, los espines y el momento electromagnético del electrón y de los núcleos [Müller-Herold y Primas, 1984, p. 309].

Por consiguiente, en todos los ensayos científicos donde se puede realizar un cálculo *ab initio* que se ajuste a la estructura experimentalmente observada de una molécula, el resultado se toma como explicación teórica de esta observación; pero ¿qué implicaciones tiene esto para el abrumador número de moléculas que no pueden tratarse con el enfoque *ab initio*? ¿Tenemos que aceptar que su estructura está inexplicada y así se ha de quedar? La mayoría de los químicos negarían lo anterior. Una mirada a los libros de texto clásicos de química, en especial de química orgánica, muestra que el principio explicativo más común en el contexto de las estructuras moleculares de todos los días no se refiere para nada a la ecuación de Schrödinger. Se trata más bien de un principio que ocupa un lugar central en el modelo de la "mecánica molecular": el principio de la *tensión estérica*.

Si le preguntáramos a un estudiante de química por qué la molécula de etano (CH_3–CH_3) adopta una conformación alternada y no eclipsada (véase la figura VII.2), respondería algo así como: en la conformación alternada los átomos de hidrógeno enlazados con los dos átomos de carbono están colocados lo más lejos posible unos de otros. En el caso de la conformación eclipsada ocurre lo contrario. Por tanto, la tensión estérica derivada de la repulsión entre los átomos de hidrógeno es mínima en la conformación alternada, y ésta es la preferente (véase, por ejemplo, Christen y Vögtle, 1988, p. 69).

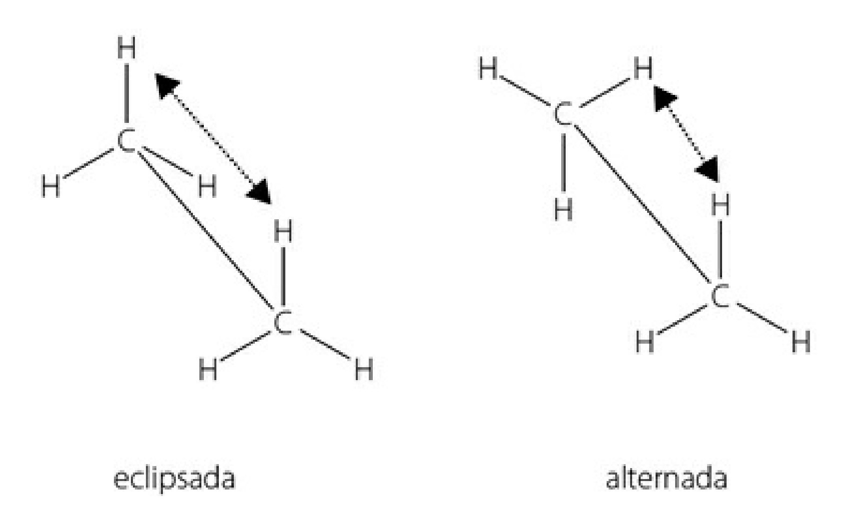
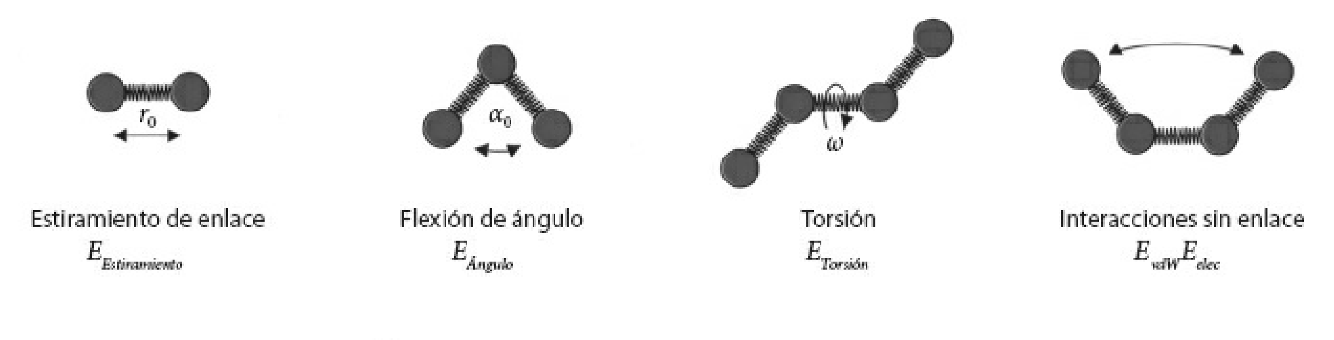


FIGURA VII.2. *Conformación eclipsada y alternada del etano.*

El enfoque de la mecánica molecular, o del campo de fuerza, aplica esta línea de razonamiento a un modelo computacional. Se basa en la concepción simplificada de las moléculas como *bolas y palos*. Según esta concepción, las moléculas se componen de átomos conectados por palos elásticos. Si supiéramos la longitud de equilibrio y la fuerza de los palos específicos del tipo de átomo, podríamos construir un modelo de la molécula en su estado de equilibrio. Tal es, simplificado, el procedimiento de un cálculo de campo de fuerza. Sin embargo, para trasladar el procedimiento a un programa de computadora, tenemos que suponer ciertos potenciales de fuerza que describan la deformación de los "palos", así como "números", esto es, valores numéricos de los parámetros de los potenciales de fuerza. Como ya lo indica la expresión "mecánica molecular", los potenciales de fuerza se refieren a potenciales de fuerza mecánica simple, y describen la fuerza necesaria para el estiramiento de enlaces, flexión de ángulos, torsión en torno de un enlace, interacciones de Van der Waals y Coulomb (véase la figura VII.3, fila superior).

La energía total de la tensión estérica de una molécula es la suma de todos los potenciales mecánicos individuales (figura VII.3, parte media). Lo que un campo de fuerza parametrizado describe es la energía de tensión total de una molécula como función de la disposición tridimensional de los átomos de la molécula. Hasta aquí hemos dado por cierto que ya conocíamos valores adecuados de los parámetros de potencial de

fuerza. Sin embargo, la *parametrización* de un campo de fuerza, que resulta decisiva en este método, no es en modo alguno un procedimiento bien definido. Aparte de determinar los parámetros por cálculos *ab initio*, lo que todos los procedimientos de parametrización tienen en común es que intentan generar los parámetros que mejor se ajustan a los datos experimentales. De ahí que este modelo se haya etiquetado de *empírico*. Dependiendo tanto del método de parametrización aplicado[4] como de los potenciales de campo de fuerza supuestos, existen "campos de fuerza" distintos, con parámetros variables de campo de fuerza. Cuáles de ellos elegir es una pregunta sujeta a consideraciones pragmáticas; pero una vez más, como en el caso del enfoque *ab initio*, la posibilidad de calcular puntos arbitrarios sobre la hipersuperficie de energía no nos permite por sí misma deducir aquellos puntos de la superficie que corresponden a conformaciones *estables* de la molécula observada experimentalmente. Sin embargo, en comparación con el método *ab initio*, el menor esfuerzo computacional de un cálculo de campo de fuerza posibilita, además de procedimientos de optimización de geometría local, realizar búsquedas *globales* en la hipersuperficie. Aclaro que, en la mayoría de los casos, no es posible cribar sistemáticamente la hipersuperficie de energía en busca de mínimos energéticos con un simple ejemplo. Es a título ilustrativo por lo que la hipersuperficie de energía que se muestra en la figura VII.3 (abajo derecha) se basa sólo en dos parámetros conformacionales. Como el número de grados conformacionales de libertad de una molécula es $3N - 6$ (donde N es el número total de átomos de la molécula), la hipersuperficie de energía incluso de una molécula simple como el etano alcanza ya las 18 dimensiones. Así, un cribado sobre la base de una resolución de 10 puntos por dimensión requeriría ya el cálculo de 10^{18} conformaciones distintas. La única manera de acometer un problema de búsqueda tan complejo es aplicar algoritmos de optimización global que, de una u otra manera, dependen de elementos estocásticos. De los múltiples métodos que se aplican, sólo se mencionarán aquí los dos más populares.



$$E_{Tensión} = \sum_{i=1}^{n} \left(E_{Estiramiento} + E_{Ángulo} + E_{Torsión} + E_{vdW} + E_{elec} + E_{cruz} \right)$$

Ejemplo de campo de fuerza MM2:

$$E_{Estiramiento} = \frac{1}{2} \cdot k_b \cdot \left[(r - r_0)^2 - 2 \cdot (r - r_0)^3 \right]$$

$$E_{Ángulo} = \frac{1}{2} \cdot k_a \cdot \left[(\alpha - \alpha_0)^2 + const \cdot (\alpha - \alpha_0)^6 \right]$$

$$E_{Torsión} = k_{t1} \cdot (1 + \cos\omega) + k_{t2} \cdot (1 - \cos 2\omega) + k_{t3} \cdot (1 + \cos 3\omega)$$

Hipersuperficie de energía molecular:

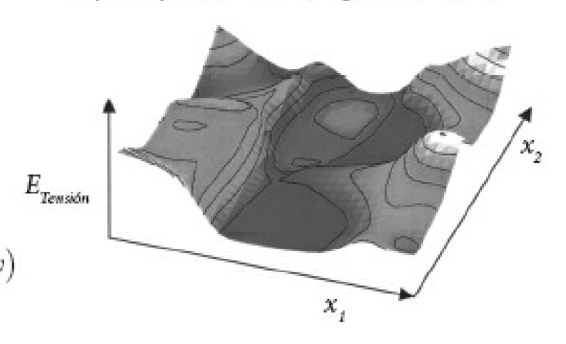
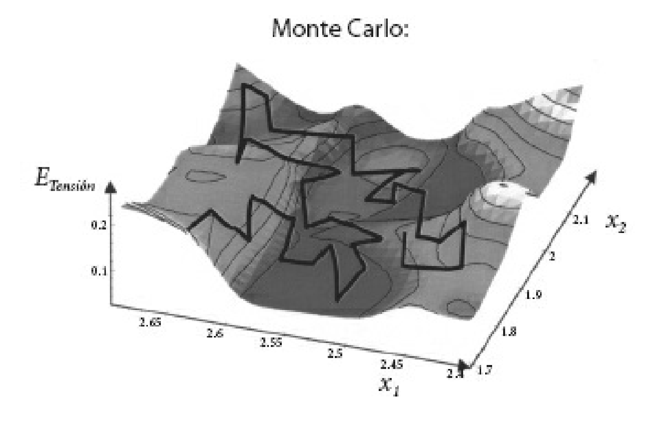
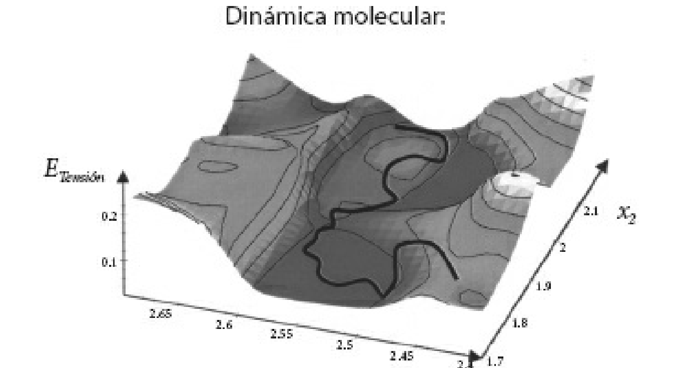


FIGURA VII.3. *Ilustración de un modelo de campo de fuerza. Fila superior: distintos tipos de interacciones; parte media: expresión de la suma de la energía de tensión estérica* (i: *átomo* i; n: *número total de átomos de la molécula); abajo izquierda: el campo de fuerza MM2 como ejemplo* (r_0: *longitud de equilibrio;* α_0: *ángulo de equilibrio;* ω: *ángulo de torsión;* k_a, k_b, k_{t1}: *constantes de fuerza); abajo derecha: ilustración de una hipersuperficie de energía molecular con dos parámetros conformacionales*: x_1 *y* x_2.

El método de *Monte Carlo* es un algoritmo estocástico de búsqueda que realiza un recorrido aleatorio sobre la hipersuperficie de energía (figura VII.4, izquierda). En su forma más simple, a partir de un punto de partida arbitrario, $x\vec{x}$ (t_i), se alcanzan nuevos puntos, $x\vec{x}$ (t_{i+1}), en la hipersuperficie dando pasos aleatorios, $\vec{x}_{alea}$. Una vez que se han dado tantos pasos como sea posible, la trayectoria por el espacio conformacional de la molécula se criba en busca de aquellos de sus mínimos energéticos que se han propuesto como las estructuras más estables. El método de la *dinámica molecular* es más interesante desde el punto de vista físico porque trata de simular la trayectoria de espacio-tiempo de los átomos de la molécula integrando las leyes newtonianas del movimiento. Como no se dispone de una solución analítica para esto, hay que obtenerla numéricamente, por ejemplo, usando el enfoque de la serie de Taylor y truncando la serie después del segundo miembro (figura VII.4, abajo derecha). Así, cuando se empieza con una conformación inicial $\vec{x}$ (t_0) y velocidades iniciales $\vec{x}$ (t_0), la conformación después de un paso de tiempo Δt se puede calcular si se conocen las fuerzas que actúan

sobre los átomos.





Random walk:

$$\vec{x}(t_{t+1}) = \vec{x}(t_t) + \vec{x}_{alea}$$

Leyes newtonianas del movimiento:

$$\vec{F}(t) = m \cdot \ddot{\vec{x}}(t) \qquad \vec{F}(t) = \frac{\partial E}{\partial \vec{x}(t)}$$

Expansión de Taylor:

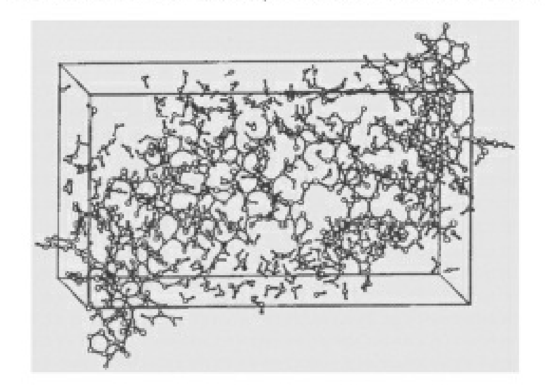
$$\vec{x}(t + \Delta t) = \vec{x}(t) + \dot{\vec{x}}(t) \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \ddot{\vec{x}}(t) \cdot \Delta t^2 + \ldots$$

$$\vec{x}(t_0 + \Delta t) = \vec{x}(t_0) + \dot{\vec{x}}(t_0) \cdot \Delta t + \frac{1}{2} \frac{\vec{F}}{m} (t_0) \cdot \Delta t^2$$

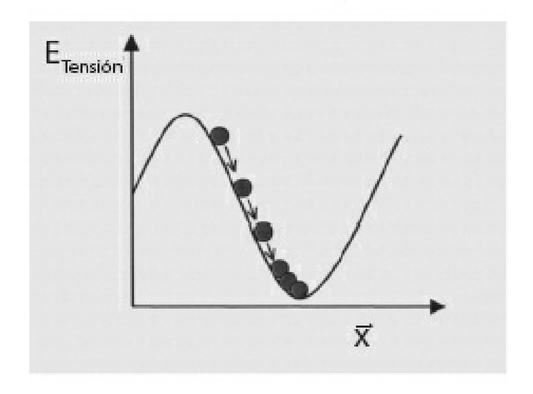
FIGURA VII.4. *Búsqueda conformacional; método de* Monte Carlo *(izquierda) y método de la* dinámica molecular *(derecha)*.

El problema, no obstante, radica en que estos pasos de tiempo tienen que ser muy pequeños para dar validez al enfoque de la serie de Taylor, y suelen encontrarse en el orden de 10^{-15} s. De ahí que el lapso completo durante el cual puede simularse la trayectoria de una molécula sea bastante corto y, una vez terminada la simulación, casi siempre persiste alguna duda de si se habrán recorrido las regiones energéticamente más favorables de la hipersuperficie.

Estructura de la crambina por cristalografía de rayos X (celda unidad):



Descenso de máxima pendiente:



Resultados:

Campo de fuerza	*mc [Å]*
Amber	0.22
Amber/OPLS	0.17

mc: desviación cuadrática media de todos los átomos no hidrogénicos

Tiempo de cómputo: varios meses

FIGURA VII.5. *Minimización energética de la estructura cristalina de la crambina. La minimización tiene en cuenta 1 356 átomos. Celda unidad de la imagen de la estructura cristalina, obtenida por el procedimiento de minimización del descenso de máxima pendiente con los campos de fuerza Amber y Amber/OPLS* (mc: *desviación cuadrática media entre la estructura observada y la calculada); tomado de Jorgensen y Tirado-Rives, 1988.*

En el caso de moléculas grandes como las proteínas, en especial, lo anterior puede dar lugar a graves problemas. Por ejemplo, el tiempo efectivo que una proteína tarda en plegarse del estado desnaturalizado al globular varía entre un segundo y varios minutos. Representar este proceso en una simulación de dinámica molecular llevaría alrededor de 10^8 s, intervalo de tiempo que supera la edad estimada del universo. Sin embargo, lo que puede hacerse es usar casos donde se conoce la estructura del estado sólido de la proteína para validar el campo de fuerza correspondiente. Si el campo de fuerza es adecuado, debería reproducir la estructura proteica experimentalmente observada como mínimo energético de la correspondiente hipersuperficie de energía. Esto significa que, partiendo de la estructura proteica observada, la estructura del modelo por optimización geométrica local no debería estar demasiado alejada del punto de partida. La figura VII.5 ilustra tal validación por optimización local (figura VII.5, arriba derecha) en el caso de los dos campos de fuerza Amber y Amber/OPLS y la proteína *crambina* (figura VII.5, arriba izquierda).

El modelo de la mecánica molecular goza de gran popularidad entre los químicos y hay

un extraordinario número de artículos que dan cuenta de la aplicación de este método. También se considera que su amplia aplicación aumenta nuestro entendimiento y nuestra capacidad para explicar las características estructurales de las moléculas tratadas.[5] Sin embargo, como lo indica el último ejemplo, hay niveles máximos respecto al tamaño de las moléculas cuya estructura puede predecirse de manera adecuada. En el caso particular de las proteínas, tales predicciones pueden ser de enorme importancia práctica. El último modelo que discuto es un método que se emplea para predecir la estructura secundaria de una proteína, esto es, su modo de plegamiento, a partir solamente de información sobre su estructura primaria, o sea, su secuencia de aminoácidos.

Modelo de la inteligencia artificial; simulación de redes neuronales

Las simulaciones de la red neuronal, derivadas de los esfuerzos de los científicos cognitivos para modelizar la estructura y la organización del cerebro humano, son herramientas poderosas para abordar casi toda suerte de problemas de clasificación y extrapolación. En el caso especial de la química, han encontrado aplicación en tareas tan diversas como la interpretación de espectros, el control de procesos y la predicción de la estructura secundaria de las proteínas (Gasteiger y Zupan, 1993). El tipo de arquitectura de red empleado en este último caso se llama algoritmo de red de "retropropagación". Esta red se compone de unidades algorítmicas, llamadas neuronas, que están dispuestas en capas (figura VII.6b).

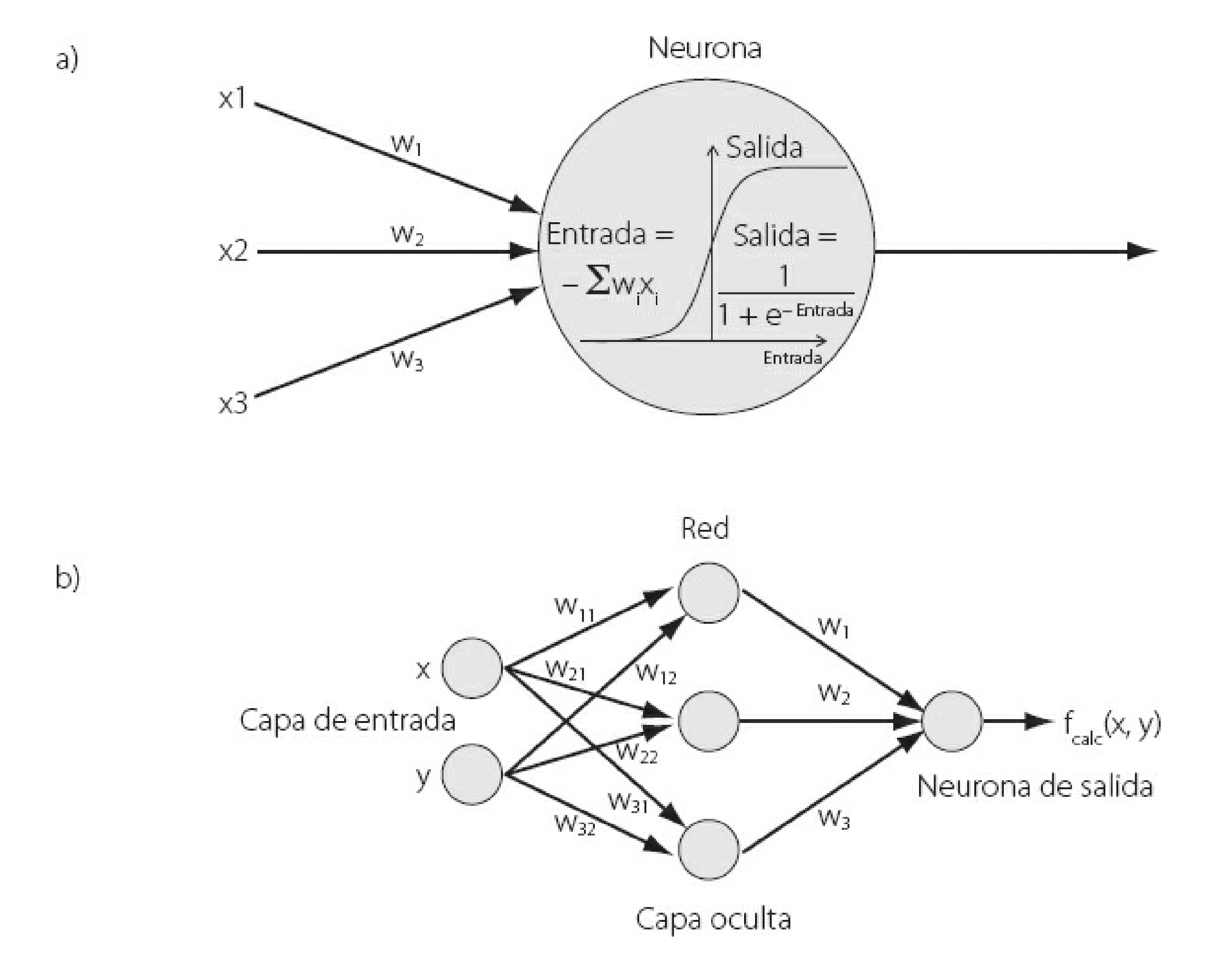
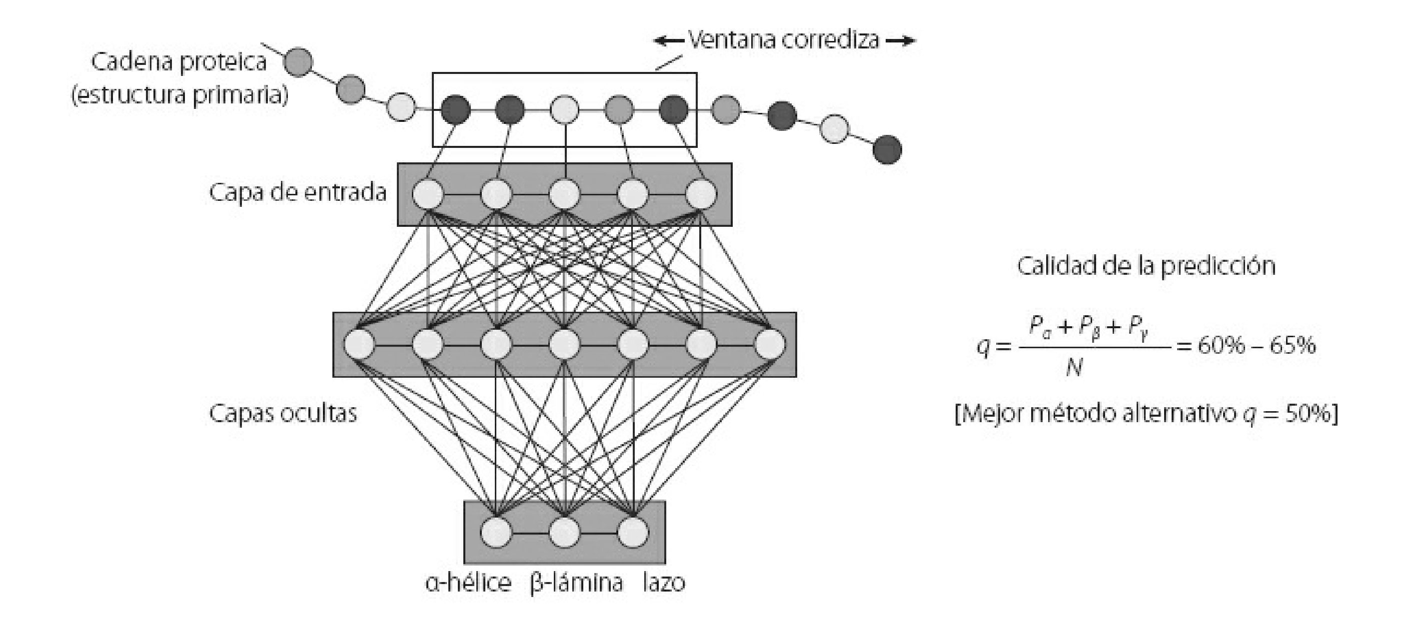


FIGURA VII.6. *Estructura principal de una red de retropropagación: a) procesamiento de información de una neurona; b) estructura ilustrativa de una red con dos neuronas de entrada, una capa oculta de tres neuronas y una capa de salida consistente en una neurona de salida.*

Como lo indica la figura VII.6b, cada neurona de una capa se conecta con todas las neuronas de la siguiente capa. Se presentan datos a las neuronas de la primera capa, la

capa de entrada. Los datos se transforman y se transmiten a las neuronas de la siguiente capa, y así sucesivamente hasta que se alcanza la capa de salida. La figura VII.6a ilustra el aspecto de esta transformación de la información. Cada una de las señales, x_i, que entran a una neurona específica se multiplica por un peso específico, w_i, asociado al enlace por medio del cual llegan. Estos productos se suman, y la suma, "Entrada", se somete a una función de transformación de señal que en la mayoría de los casos es una función de tipo sigmoidal (véase la figura VII.6a). Lo anterior genera la señal de salida de la neurona. La salida depende así de un conjunto dado de datos de entrada, de los pesos de los enlaces de entrada y de la clase de función de transformación de señal usada. Esto significa que, si queremos "adiestrar" a la red para que produzca una salida deseada al introducírsele determinadas señales de entrada, tenemos que adaptar la matriz de pesos de la red, lo cual se consigue por un proceso iterativo de adaptación.

En el caso químico que aquí se considera, el adiestramiento lo proporcionan pares de datos donde la secuencia de aminoácidos de un segmento de cadena proteica es la entrada y el modelo asociado de plegamiento de la cadena es la salida. La figura VII.7 ilustra el aspecto característico de una red que tiene en cuenta tres modelos de plegamiento (α-hélice, β-lámina y lazo). Desde luego, los datos de adiestramiento no son sino una pequeña fracción de los datos disponibles y, una vez terminado el adiestramiento, la calidad de la red adiestrada se prueba con datos remanentes de proteínas. En su fecundo ensayo sobre el enfoque de las redes neuronales, Quian y Sejnowski informaron de resultados notablemente mejores que los de cualquier método alternativo (véase la figura VII.7). Hoy es un método sin igual en lo que se refiere a predecir los modos de plegamiento de las proteínas. A diferencia de los modelos *ab initio* y de la mecánica molecular, hay acuerdo general en que este modelo no tiene valor explicativo. Gasteiger, uno de los proponentes de las redes neuronales en química, juzga así la situación: "Por satisfactorios que nos parezcan los resultados obtenidos por las redes neuronales, no pueden dar una *explicación* […]" (Gasteiger y Zupan, 1993, p. 216; las cursivas son del original).



Véanse por ejemplo: Quian y Sejnowski (1988); Chandonia y Karplus (1995).

FIGURA VII.7. *Representación esquemática del uso de una red de retropropagación para predecir estructuras proteicas secundarias.*

Hay una opinión parecida respecto a la predicción de la estructura secundaria de las proteínas. Uno de los libros de texto usuales en la materia resume así los aspectos negativos de los modelos de redes neuronales:

i) El método tiene muy poca capacidad explicativa; un diagrama de Hinton[6] no significa nada para un químico de proteínas.
ii) Se usan poco las teorías química y física [King, 1996].

El modelo de la mecánica molecular ilustra cómo proceden los químicos cuando tratan de explicar las estructuras moleculares. Resulta que la explicación sigue siendo una asignatura pendiente en este caso, y que la simple predicción, como ocurre con el enfoque de las redes neuronales, no tiene en sí misma utilidad explicativa. Por otra parte, resulta notable que se hayan elogiado las virtudes explicativas, no de uno, sino de dos modelos conceptualmente muy distintos. A continuación investigo si este resultado de la práctica científica se refleja en un análisis que aplique los dos principales modelos de explicación científica —el nomológico-deductivo y el causal— a los tres métodos de modelización tratados hasta aquí. Para este fin, primero bosquejo brevemente ambos modelos y luego abordo su aplicación a nuestro ejemplo del "mundo real".

De acuerdo con una clasificación que se remonta a Coffa (1974), hay dos grandes *familias* de modelos de explicación científica: los *epistémicos* y los *ónticos*. El ejemplo epistémico más representativo es el modelo deductivo nomológico de Hempel, o *modelo ND* para abreviar, mientras que el modelo óntico por antonomasia es el *modelo causal* de explicación. A continuación abordo cada uno de ellos.

Para Hempel, explicar un acontecimiento o un hecho —en general aquello que necesita ser explicado, el *explanandum*— significa deducir el *explanandum* de un conjunto de leyes que tienen la forma lógica de una condicional general y ciertas condiciones *antecedentes* que, juntas, son la parte *explicativa* de la explicación o *explanans* (Hempel y Oppenheim, 1948; Hempel, 1977). Así, en el caso más simple de una sola ley y una sola condición de contorno, una explicación tiene la siguiente forma lógica:

Dada la ley *"Todos los hombres son mortales"* (con *Fx: "x es hombre"* y *Gx: "x es mortal"*), y dado el antecedente *"Sócrates es humano"*:

$$\forall x Fx \subset Gx \quad \frac{Fx}{Gx}$$

el antiguo silogismo aristotélico resulta entonces

$$\begin{array}{c} \forall x \quad Fx \subset Gx \\ \dfrac{Fx}{Gx} \end{array}$$

ser una explicación del hecho de que Sócrates es mortal y, como sabemos y Aristóteles bien sabía, Sócrates de hecho murió.

Desde luego, existen ciertas restricciones; por ejemplo, es necesario que el antecedente tenga algún contenido empírico. Además, y de manera más importante, las expresiones que tienen forma lógica de ley, pero que no dejan de ser meras generalizaciones *accidentales*, no son componentes válidos del *explanans*. [7] Por eso, lo que hace admisible una explicación es su capacidad para aumentar la *esperabilidad nómica* del *explanandum;* las explicaciones dan buenas razones en apoyo de que se ha observado cierto fenómeno, pero no imponen más restricciones al tipo de regularidades a las que tienen que referirse las leyes que se citan en una explicación científica. Por eso los modelos de explicación *epistémicos* son, por decirlo así, menos dogmáticos que los ónticos. En estos últimos intervienen ciertos supuestos sobre la constitución del mundo. Se debe suponer que el mundo *opera* de determinada manera, que la naturaleza, como dice Salmon, está organizada con arreglo a pautas específicas. La respuesta a la pregunta de cómo está organizado el mundo y qué lo mantiene unido radica comúnmente en lo que se ha llamado su *nexo causal*. Al margen de la cuestión de en qué consiste realmente

la causalidad, lo que unifica a las distintas escuelas de teóricos de ésta es su convicción de que, para explicar cierto acontecimiento o hecho, se tiene que revelar su marco causal. Salmon dijo: "Dar explicaciones científicas es mostrar cómo se ajustan los acontecimientos y las regularidades estadísticas al marco causal del mundo" (1977, p. 166).

La diferencia entre los modelos epistémico y óntico de explicación se aclara aquí. *"Causa… porque"*, como elegantemente dice Philip Kitcher, es el lema de la escuela epistémica. Las explicaciones suelen referirse a causas sencillamente porque éstas explican mucho, pero no hay condición *sine qua non* (Kitcher, 1989). Si resultara que otras regularidades no causales son mejores vehículos explicativos, entonces se descartaría la explicación causal. El partidario del modelo óntico de explicación, en cambio, sostiene que cualquier explicación válida tiene que citar causas del *explanandum* porque la explicación debe su único sentido posible a una presunción completa de la constitución óntica de nuestro mundo. Quienes quieren sujetar la validez de las explicaciones a su dependencia de causas tienen que responder la pregunta de en qué consiste la causalidad. Aquí esbozo las dos principales descripciones de la causalidad.

Según la teoría de procesos de la causalidad recientemente expuesta por Salmon y Dowe, una cadena de sucesos causales no es una serie discreta de acontecimientos u objetos como la definió Hume, sino un *proceso* continuo indivisible (Salmon, 1981; Dowe, 1992). Me propongo aquí reconciliar la tradición empirista —la tradición de Hume— con el concepto de causalidad dando, primero, una descripción apropiada de los procesos causales y, después, criterios empíricamente significativos que permitan una distinción entre procesos causales reales y simples pseudoprocesos. Uno de los escenarios primordiales de la historia de la filosofía quizá sirva para ilustrar esta distinción: fue Platón quien habló de prisioneros encadenados en una cueva en su célebre alegoría de la caverna. Las escenas que los prisioneros ven en la pared de la caverna no son reales, sino meras sombras o, como dice Salmon, pseudoprocesos. ¿Cómo podían saber esto los prisioneros de Platón? Al atacar con una lanza a los enemigos fantasmagóricos que veían en la pared, por ejemplo, habrían observado que cualquier herida que les hubieran infligido en un momento *t* no habría alterado su comportamiento en ningún momento posterior a *t*. Según Salmon, un criterio esencial de validez de cualquier proceso causal real es su manipulabilidad o, para ser preciso, su capacidad para *transferir una marca*. [8] Un enemigo fantasmagórico no llevaría la marca de estar herido en ningún momento posterior a *t* porque los procesos de la pared no son procesos causales reales, sino meros pseudoprocesos. Este criterio de transferencia de una marca es de especial interés para la descripción de la causalidad que hace el químico.

Otra descripción de la causalidad que, a diferencia de la de Salmon, se basa explícitamente en el supuesto humeano de acontecimientos discretos, es parte de la teoría de los contrafácticos expuesta por Lewis en 1973. Así define Lewis una serie causal de acontecimientos:

> Supongamos que c_1, c_2,… y e_1, e_2,… son distintos hechos posibles, tales que no pueden coexistir dos de

los *c* ni dos de los *e*. Digo entonces que la familia de hechos e_1, e_2,… *depende causalmente* de la familia c_1, c_2,… si y sólo si la familia de proposiciones $O(e_1)$, $O(e_2)$,… ["O(e)" es la proposición de que e ocurra] depende contrafácticamente de la familia $O(c_1)$, $O(c_2)$,… Como decimos, si e_1 o e_2 o… ocurre, depende de si c_1 o c_2 o… ocurre [Lewis, 1973, p. 562].

"Dependencia contrafáctica" significa que *si los hechos c_1, c_2,… hubieran ocurrido, los hechos e_1, e_2,… también habrían ocurrido*. El problema de verificar una dependencia causal se traslada así al problema de verificar una *dependencia contrafáctica*. Lewis trata de plasmar esta clase de dependencia con una semántica de palabras posibles. En consecuencia, un suceso *e* depende contrafácticamente de otro suceso *c*, si en el mundo real M_r, el mundo posible más próximo M_c en el cual se produce *c*, también ocurre *e*. Consideremos el ejemplo que dimos antes. El contrafáctico *Si el enemigo hubiera recibido una estocada de lanza, habría resultado herido* sería cierto si, y sólo si, en el mundo posible más cercano a aquel en que se expresó el contrafáctico de que el enemigo recibió una estocada también ocurre que está herido. Desde luego, es decisivo disponer de una medida precisa de *semejanza* para determinar la distancia entre dos mundos posibles. Como el tema de este ensayo no es el concepto mismo de causalidad, sino su empleo en las teorías de explicaciones científicas, no diré nada más sobre este punto ni sobre el delicado problema de cómo ponderar la semejanza entre dos mundos.

Es característico de ambos conceptos de causalidad, por distintos que sean, el hecho de que vinculan su concepción de la causalidad con la de la explicación científica. Así, en opinión de Lewis, una explicación válida debe esclarecer los antecedentes causales del acontecimiento que se está explicando. Salmon también requiere que la explicación muestre de qué manera se ajusta el *explanandum* a los procesos causales de nuestro mundo.

Aplico ahora los dos conceptos bosquejados de explicación científica —el modelo DN y el modelo causal— a los tres métodos para inferir la estructura molecular descritos en la sección "En el cuadro de la química: explicación de las estructuras moleculares". La figura VII.8 resume los tres enfoques de modelización molecular.

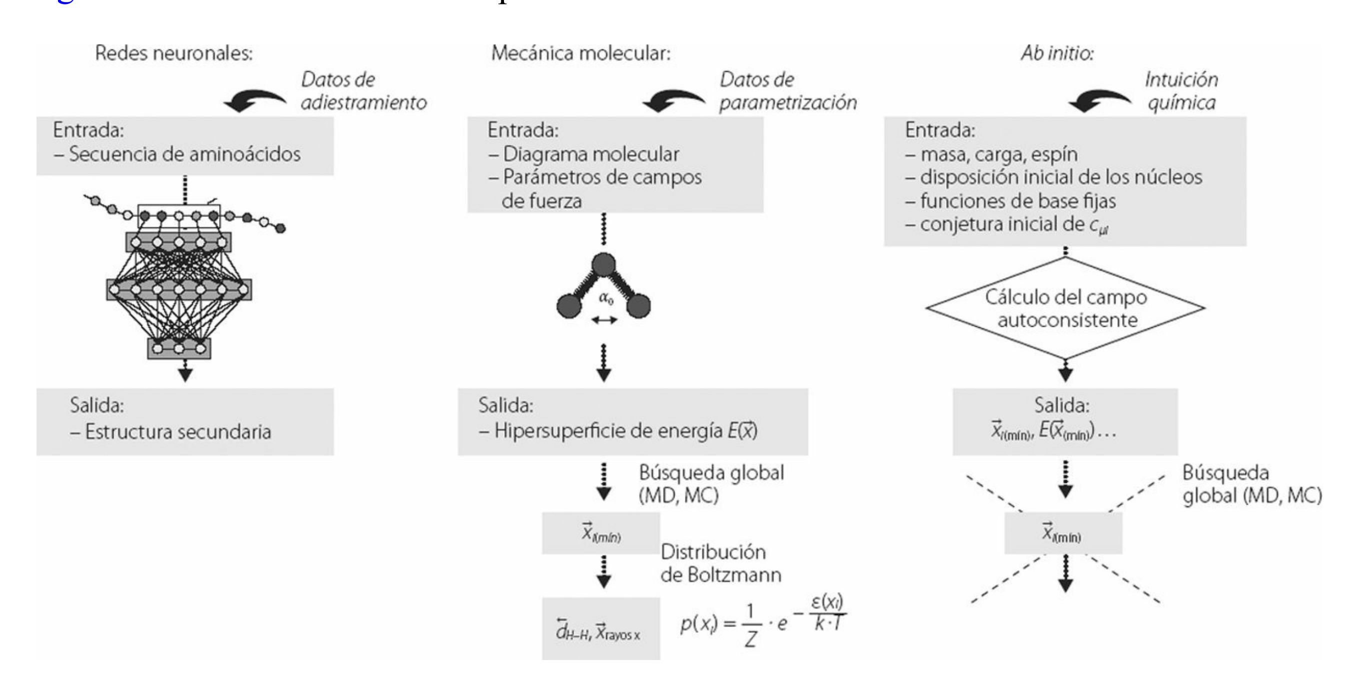


FIGURA VII.8. *Recapitulación de los tres modelos para la descripción de estructuras moleculares tratados en el texto. Izquierda: red neuronal; centro: mecánica molecular; derecha*: ab initio.

El método de las simulaciones de redes neuronales requiere apenas una breve discusión. Comencemos por el modelo causal de explicación. Es obvio que en el proceso de inferir una predicción basada en una simulación de red neuronal no se hace referencia a hecho o suceso causal alguno. Lo anterior queda especialmente claro porque una red neuronal podría reproducir fácilmente regularidades que son ejemplos clásicos de asimetría causal. Por ejemplo, sería fácil adiestrar a una red neuronal para que predijera la longitud de un asta a partir de la longitud de su sombra. Para ser preciso, si no existen restricciones tales como que los datos de entrada y salida usados en el proceso de adiestramiento se refieran a un proceso causal, una relación representada por una red adiestrada no puede tener capacidad de explicación causal.

El modelo DN tampoco es aplicable. Como se dijo en la sección "Modelo de la inteligencia artificial; simulación de redes neuronales", las regularidades que una red adiestrada ha "aprendido" están representadas en su matriz de pesos. Aunque se conocieran todos los detalles de la red, tal regularidad no podría expresarse con una función matemática, sino sólo de la siguiente manera algorítmica:

> *Sumar las señales de entrada de cada neurona, multiplicadas por los pesos de los enlaces correspondientes, y tomar el producto como dato de entrada para la función de transformación de señal de la neurona. Tomar la salida como entrada para que todas las neuronas conectadas en la capa siguiente hagan lo mismo… hasta que se alcancen las neuronas de salida.*

Es evidente que esto difícilmente podría considerarse una ley científica. Así, no hay manera de describir el proceso de inferir valores de salida como deducción nómica ni como argumento que recurra a determinada ley o conjunto de leyes. Y esto es precisamente lo que el modelo de explicación deductivo nomológico requiere.

Tanto el modelo de explicación DN como el causal fracasan en la descripción de las predicciones hechas por las simulaciones de redes neuronales. No obstante, dado que, como se dijo antes, los mismos científicos que trabajan con estos métodos no pretenden ofrecer explicaciones, este resultado parece satisfactorio y podría considerarse una confirmación, aunque negativa, de ambos modelos de explicación. Al menos en este caso más bien trivial, la filosofía de la ciencia y la práctica científica están de acuerdo.[9]

Esta posibilidad parece más prometedora. Consideremos primero el modelo DN. Como se ha señalado, el modelo de la mecánica molecular se basa en varios potenciales de campos de fuerza que se refieren a leyes científicas propiamente dichas. Dado el diagrama molecular —los distintos tipos de átomos contenidos en una molécula y sus conexiones— y un conjunto de parámetros de campos de fuerza, se puede inferir la energía de tensión total de la molécula correspondiente a cada disposición atómica posible. ¿Es ésta una explicación deductiva nomológica? La respuesta es no, y por dos razones. La primera se refiere al carácter nómico de las deducciones hechas por los modelos de la mecánica molecular. Los potenciales individuales de campos de fuerza elegidos para describir las interacciones atómicas sin duda tienen alguna semejanza con las leyes propias. Aun así, como se ha dicho, la forma matemática de estos potenciales y los valores numéricos de los parámetros contenidos en ellos varían considerablemente de un campo de fuerza a otro. Esto es consecuencia de considerar que los potenciales usados en un modelo de campos de fuerza reproducen los datos experimentales subyacentes en el mayor grado posible cuando se aplican a los datos *en conjunto*. El significado físico de un campo de fuerza es por tanto *holístico*. Sólo la suma de todos los potenciales, y no éstos por separado, debe describir correctamente las propiedades moleculares pertinentes. Por eso, la literatura de la mecánica molecular suele advertir al lector que no use potenciales de campos de fuerza u otros parámetros por separado para describir interacciones atómicas aisladas dentro de una molécula.[10] En consecuencia, la expresión de la suma de todos estos potenciales, que se considera la única parte físicamente pertinente de un campo de fuerza (véase la figura VII.3, parte media), no puede considerarse una ley física propiamente dicha. Es más bien una generalización accidental, aunque sea válida para un gran número de moléculas distintas.

Hay un segundo problema en el supuesto carácter deductivo de las inferencias del enfoque de la modelización molecular. Es cierto que el cálculo de un punto aislado en la hipersuperficie de energía es un paso deductivo, pero esto no es más que la mitad de la historia. Además, para encontrar conformaciones estables hay que hacer una búsqueda global en la hipersuperficie a fin de hallar mínimos energéticos. Sin embargo, como el nombre "búsqueda" ya lo indica, no se trata de un problema que se pueda resolver de manera analítica. Los algoritmos de búsqueda global, de una u otra forma, siempre contienen elementos estocásticos. Por tanto, una simulación de Monte Carlo no necesariamente da por resultado una conformación estable idéntica en distintas ejecuciones del programa, sino que puede producir conformaciones diferentes entre una ejecución y otra.

Doy un ejemplo para ilustrar lo anterior: supongamos que un ciego tiene ante sí un modelo de superficie ondulada. Debe encontrar las depresiones más profundas lanzando pelotas sobre ella. Percibe la altura por el oído. Por refinada que fuera su técnica para arrojar las pelotas, en cada ocasión obtendría resultados distintos. No *deduce* la depresión más profunda de la superficie.[11] De igual manera, el proceso *real* de inferir

conformaciones estables mediante la mecánica molecular no es enteramente deductivo.[12]

De ahí que falle el intento de subsumir la mecánica molecular en el modelo DN de explicación científica. Falla dos veces: en primer lugar, la suma de los potenciales de campos de fuerza usados en los cálculos de mecánica molecular no tiene estatus de ley científica propia, y la inferencia de la energía de tensión de una molécula mediante la mecánica molecular no es *nomológica*. En segundo lugar, la búsqueda conformacional necesaria para hallar conformaciones estables es estocástica y no *deductiva*.

Considérese el modelo causal de explicación. ¿No es la simulación dinámicomolecular de una molécula un ejemplo clásico de simulación de un *proceso causal*, y no es el modelo causal de explicación, por tanto, el candidato perfecto para describir estas simulaciones como explicaciones? Para abordar la primera pregunta, considero las dos concepciones de causalidad antes tratadas, a fin de ver si una u otra sirve para representar el método dinámicomolecular como ilustrativo de un proceso causal. Téngase presente que, en general, cuando preguntamos si un proceso es causal, no podemos examinar el proceso mismo, sino que debemos confiar en un modelo que lo simule. Lo anterior no es una simple necesidad práctica —en nuestro ejemplo, sin ir más lejos, no es posible observar la trayectoria de una molécula—, sino una consecuencia del propio concepto de causalidad. Quizá con excepción del criterio inicial de Salmon de la transferencia de una marca, la pregunta de en qué consiste la causalidad está estrechamente ligada al modelo causal que la propia ciencia ha hecho proliferar.

El ejemplo de la dinámica molecular es idóneo para ilustrar este punto. ¿Es el proceso descrito por la dinámica molecular una simulación? Dicho de otro modo, ¿es la trayectoria espacio-temporal de todos los átomos de una molécula un *proceso causal* en el sentido que Salmon requiere? En primer lugar, el mismo término *proceso* plantea un problema. Desde el punto de vista de Salmon, los procesos son ontológicamente *continuos*. No pueden dividirse en partes o etapas discretas (1981). Este requisito choca con cualquier intento de simular un proceso en la computadora. Por ejemplo (véase la sección "El modelo de la mecánica molecular"), para describir la evolución temporal de una molécula, la computadora calcula su estado en intervalos de tiempo discretos Δt. Aunque estos intervalos pueden ser muy pequeños, el hecho no deja de ser problemático.[13] Podría objetarse que se trata de un simple problema epistemológico, debido a la búsqueda numérica de soluciones a ecuaciones diferenciales, mientras que el requerimiento de Salmon pretende ser ontológico. Sin embargo, nada en nuestras ecuaciones diferenciales garantiza que el proceso representado por una simulación dinámico-molecular sea efectivamente continuo. No podemos menos que concluir que, para efectos prácticos, nuestro modelo es incapaz de describir correctamente este aspecto del sistema.[14]

Dejando a un lado esta dificultad general, la descripción de Salmon puede aplicarse a nuestro ejemplo. Podemos marcar cierto átomo de una molécula en el modelo, por ejemplo, dándole otro color. El átomo conservará el color después de varios intervalos de tiempo. No obstante, una simulación de Monte Carlo falla. Aquí el proceso descrito por

el modelo, un recorrido aleatorio en el espacio conformacional, no está pensado para ocurrir en *tiempo real*, por lo que el criterio de Salmon ni siquiera puede aplicarse. La descripción inicial de Salmon del proceso podría usarse, como de hecho la han usado los químicos, para determinar cuál de los diversos procesos que pueden haber ocurrido durante una reacción química es el *real*. Me refiero a la técnica de marcar moléculas con isótopos para determinar el *mecanismo de reacción* subyacente. Tales experimentos con trazadores son una técnica habitual en química.

Es extraño, sin embargo, citar este caso en apoyo de la teoría de Salmon. La finalidad de un experimento con trazador no es distinguir procesos causales de pseudoprocesos, sino distinguir un proceso causal entre varios posibles. Se parte del supuesto de que todos estos procesos son causales. Tales experimentos se conforman a la descripción de Salmon; no la confirman. Incluso esta conformidad es dudosa. Una de las condiciones esenciales de Salmon era que, después de marcar el proceso en el momento t_1 y advertir la marca en el momento t_2, toda interacción posible entre t_1 y t_2 debía excluirse para usar la observación como indicación de un proceso causal real (1984). Esto evidentemente no es cierto en el caso de una reacción química. Desde el momento en que se introduce un átomo trazador hasta aquel en que es detectado ocurren múltiples interacciones. Algunas de ellas son esenciales para que se produzca la reacción. Aun si no se tienen en cuenta las interacciones entre el sistema y su entorno en forma de absorción y emisión de energía, hay muchas colisiones "necesarias" con otras moléculas reactivas; algunas de estas colisiones dan lugar a la formación de un "complejo de transición" del cual puede surgir el producto. Por tanto, la teoría de Salmon no es aplicable, en rigor, a este destacado ejemplo de la práctica científica de la química.[15] Para volver a nuestro tema de interés inicial, la simulación dinámicomolecular, al menos en la mayoría de los casos, trata a la molécula aislada. Con independencia del problema de modelizar el tiempo de manera discreta, la descripción de Salmon de la causalidad nos permite clasificar la trayectoria de una molécula como un proceso causal.

Toca ahora abordar el segundo concepto de causalidad. La descripción de Lewis de los contrafácticos, concebida como de importancia puramente metafísica, es muy difícil de transformar en teoría empíricamente aplicable. Esto se debe a que, para verificar el contrafáctico "Si A fuera el caso, B sería el caso", tenemos que averiguar si, en el mundo posible más cercano en el que A es el caso, B también lo sea. Una manera de hacerlo es simular mundos en una computadora. Supongamos, por ejemplo, que un modelo dinámico-molecular ha simulado la trayectoria de una sola molécula de etano. Consideremos este mundo de una molécula, "M_1," como nuestro mundo de referencia. Una conformación específica del etano, c_1, *¿causa* en el momento t_1 otra conformación, c_2, en el momento t_2? Según Lewis, la respuesta depende de la verdad del contrafáctico "Si el etano tuviera la conformación c_1 en t_1 (A), también tendría una conformación c_2 en t_2 (B)". El mundo posible más próximo a M_1 en el que A es cierto es un modelo dinámico-molecular donde el etano tiene la conformación c_1, pero donde intercambiamos un átomo de hidrógeno por uno de deuterio.[16] Cambiamos en consecuencia el tipo de

átomo en el modelo. Al ejecutar de nuevo la simulación podemos averiguar que la molécula de etano ligeramente alterada también adopta la conformación c_2 en el momento t_2. Podemos concluir que, dentro de una simulación dinámico-molecular, la conformación del etano c_1 en t_1 es la *causa de Lewis* de la conformación del etano c_2 en t_2.

Así, a la luz de nuestras dos descripciones de causalidad, el modelo dinámico-molecular representa procesos causales o cadenas de sucesos. Sin embargo, ¿es la inferencia de la estructura de una molécula a partir de una simulación dinámico-molecular una *explicación* causal? Aquí la respuesta es no. El modelo dinámico-molecular por sí solo no se emplea para explicar un episodio causal aclarando la evolución en el tiempo de las conformaciones de la molécula. Se emplea para hallar la situación conformacional de equilibrio que ocurre en un intervalo de tiempo teóricamente infinito. El cálculo de la trayectoria de una molécula no es más que el primer paso para inferir cualquier propiedad estructural *observable* de la molécula. Después de una búsqueda dinámico-molecular tenemos que cribar su trayectoria en busca de los mínimos energéticos. Aplicamos el principio de distribución de Boltzmann para inferir la conformación más probable de la molécula.[17] Lo que interviene aquí no es un principio causal. Este principio se deriva de la termodinámica y es por tanto estadístico. Por ejemplo, para inferir la expresión de la distribución de Boltzmann, un paso decisivo es determinar el número de realizaciones posibles de cada distribución específica de elementos en varios niveles de energía. No existe una explicación de algo como la *función de partición molecular* de un sistema en equilibrio termodinámico solamente mediante procesos o episodios causales basados en consideraciones de mundos posibles más próximos.

En este contexto, Salmon ofrece una distinción que parece abordar este problema. Distingue entre explicaciones causales *etiológicas* y *constitutivas*. Las explicaciones causales *etiológicas* son casos en los que un episodio causal puede relatarse de manera conducente al hecho que ha de explicarse. Las explicaciones causales *constitutivas* parecerían responder la pregunta planteada por las causas en un escenario termodinámico. Salmon argumenta: “Explicamos la presión que un gas ejerce sobre las paredes de un recipiente como intercambios de momento entre las moléculas y las paredes” (1988, p. 324). Nadie negará que hay, en efecto, intercambios de momento entre las moléculas y la pared, los cuales son de naturaleza causal. Sostengo, no obstante, que es parte indispensable de la *explicación* de una presión específica el presumir ciertas distribuciones de las velocidades de las moléculas. Esto es necesario para inferir la expresión subyacente fundamental de la teoría cinética de los gases. Tales distribuciones no son explicables por una descripción puramente causal. Por ejemplo, la ecuación fundamental que describe la relación entre la presión de un gas y la velocidad de las partículas se refiere a la cuadrática media de estas velocidades, *c*. Esto depende de la temperatura, *T*, del sistema:

$$p \cdot V = \frac{1}{3} \cdot N \cdot m \cdot c^2$$

mientras que N es la constante de Avogadro, V el volumen y m la masa de las moléculas. Esta velocidad media no se deriva de un episodio o proceso causal. Se presume que ocurre un gran número de tales procesos causales, todos los cuales obedecen a ciertas regularidades estadísticas. Tal presunción no sería necesaria si dispusiéramos de una explicación de aspectos *puramente* causales. Esta objeción se aplica a casi toda suerte de explicaciones que implican la *constitución* de un sistema, esto es, la estructura de un sistema que con toda probabilidad se encontrará durante cierto intervalo de tiempo t. Lawrence Sklar formula un argumento parecido. Lo dice así: "En todo caso, a una imagen causal fundamental del sistema se superpone la descripción estadística o probabilística de los fenómenos, esencial al intento de la mecánica estadística de describir los aspectos termodinámicos del mundo" (1993, p. 149).

Señala, además, que lo anterior es especialmente cierto en la descripción de sistemas en equilibrio termodinámico, tal como se presumió de principio a fin en todos los métodos de modelización antes descritos. Lo que planteo aquí es simplemente que en el proceso de *explicar* los aspectos estructurales de una molécula con métodos de la mecánica molecular, de hecho se necesita más que la simulación de su comportamiento causal.[18] Aunque la estructura interna de un sistema puede ser causal, la capacidad para describir correctamente procesos causales separados no basta por sí sola para inferir una explicación significativa de ninguna de las propiedades del sistema observables por experimentación.[19]

Por consiguiente, el enfoque de la mecánica molecular no se ajusta a ninguno de los modelos de explicación que hemos considerado, el de Salmon y el de Lewis. En el caso del modelo de simulación de redes neuronales, parecía ser satisfactorio. Ahora se opone al punto de vista del químico. El principio más importante usado en el enfoque de la mecánica molecular, el principio de la tensión estérica, es el principio explicativo de mayor relevancia usado entre los químicos. Sin embargo, es posible que este uso sea equivocado debido a una ingenuidad teórica, y que el método *ab initio* resulte una opción más prometedora como modelo explicativo correcto.

El último paso de un cálculo *ab initio*, siempre que sea abordable por computadora, es un procedimiento de búsqueda conformacional parecido al que se da en la mecánica molecular. En consecuencia, una inferencia completa de aspectos estructurales mediante métodos de la química cuántica no puede ser exclusivamente de estructura causal. Ni siquiera la primera parte del método *ab initio*, que consiste en resolver la ecuación de Schrödinger de una estructura específica de disposición nuclear, puede considerarse una explicación causal. Lo mejor que puede hacerse en un cálculo *ab initio* es comenzar por la ecuación de Schrödinger *independiente del tiempo*. Así, no todo el modelo se refiere desde el principio a la evolución del sistema en el *tiempo*. Nos permite calcular tan sólo puntos *estacionarios* en la hipersuperficie de Born-Oppenheimer.

Entonces, con independencia del problema general de dar una descripción causal de explicaciones mecanico-cuánticas (véase, por ejemplo, Salmon, 1998, p. 23), los métodos *ab initio* ni siquiera invocan procesos o mecanismos causales. El enfoque causal de la explicación no da resultado.

¿Qué hay con la explicación DN? ¿No es la inferencia química cuántica de la estructura de una molécula un ejemplo clásico de explicación científica en el sentido del modelo DN? Después de todo, en un cálculo *ab initio* comenzamos por la ecuación de Schrödinger, sin duda la ley central de la física cuántica; basta añadir algunas condiciones de contorno que especifiquen número, clase, espín y carga de las partículas del sistema para obtener, por inferencia matemática, una función de onda del estado basal de los electrones en una molécula cuya geometría presenta un núcleo fijo. Parecería que el uso de una ley científica propia y la inferencia estrictamente matemática garantizan el carácter *nómico* y *deductivo* de tal procedimiento. Sin embargo, una mirada más atenta revela dificultades. Incluso para la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y no relativista, hay que introducir un inmenso número de simplificaciones y aproximaciones. Estas aproximaciones están guiadas de manera empírica. El éxito de todo el procedimiento depende de más decisiones que se determinan empíricamente. Por ejemplo, nada en la ecuación de Schrödinger ni en las condiciones de contorno nos dice qué conjunto de funciones de base hay que usar ni cuáles deben ser los coeficientes iniciales del procedimiento de campo autoconsistente. Las reglas generales a que se sujetan estas decisiones se infieren enteramente del buen resultado de cálculos *preliminares*, y la elección adecuada de estas cantidades es decisiva para el éxito de todo el cálculo.

La situación se vuelve todavía más problemática porque tenemos que especificar una conformación inicial apropiada para cerciorarnos de que la optimización geométrica no se quedará detenida en un mínimo local de la hipersuperficie de Born-Oppenheimer. En toda la empresa interviene más conocimiento empírico en forma de intuición química y algunos resultados experimentales sobre longitudes y ángulos de enlace. En una explicación DN propia, *este conocimiento debe ir al final de una deducción y no al principio*. Una consecuencia irónica de esto es que la validación empírica de los modelos

ab initio se ha visto como una validación, no de la teoría fundamental, sino de las aproximaciones introducidas. Así lo ha dicho Redhead en su fecundo trabajo "Models in Physics":

> La teoría fundamental, la ecuación de N partículas de Schrödinger, goza de crédito debido al éxito de la mecánica cuántica para explicar las propiedades de sistemas simples, el átomo de hidrógeno, la molécula de hidrógeno, etc. Para sistemas más complicados usamos aproximaciones; la comparación con el experimento se considera entonces prueba de la aproximación y no de la teoría. Estamos haciendo una especie singular de matemáticas empíricas. ¡Probamos las aproximaciones, no examinando la situación de manera matemática, sino haciendo experimentos! Desde luego, el que la ecuación de Schrödinger ofrezca una buena descripción de sistemas simples lógicamente no nos autoriza para inferir su exactitud en el abordaje de sistemas complicados, de manera que hay aquí un paso inductivo adicional que nos lleva de los sistemas simples a los complicados [1980, p. 156].[20]

Lo anterior también pone en duda el carácter nómico del procedimiento *ab initio*. Suponiendo que el modelo usado al final de un cálculo *ab initio*, esto es, el operador de Hartree-Fock aplicado al modelo de la CLOA, no fuera deducible del modelo primordial, a saber, la ecuación de Schrödinger con el operador hamiltoniano original, parecería entonces que la "ley" que opera *de facto* en la inferencia *ab initio* está contenida en el modelo de Hartree-Fock. Sin embargo, este modelo simplificado se basa en supuestos que contradicen en parte los supuestos del modelo original. Entre tales supuestos se incluyen:

i) considerar un sistema aislado (esto es, nuestra molécula);
ii) separar el movimiento electrónico del nuclear, y
iii) dividir nuestro sistema en problemas independientes de un solo electrón.

Todos contradicen un teorema central de la física cuántica: que hay de hecho una correlación entre los estados de todas las partículas *existentes*. El modelo usado para un tratamiento químico cuántico de las moléculas tiene que depender, así, de una *teoría* drásticamente *empobrecida* (Redhead, 1980, p. 146). En consecuencia, este modelo empobrecido no es válido para todas las moléculas en cualquier circunstancia, sino sólo en combinación con ciertas condiciones *ceteris paribus*, esto es, sólo "de caso en caso". El alcance exacto de esta condición *ceteris paribus*, a su vez, tampoco se deduce del modelo original, sino que es resultado de una investigación empírica. Una de las principales tesis del trabajo de Cartwright (1983, en especial los ensayos 2, 3 y 8) es que estas "generalizaciones *ceteris paribus*" no han de considerarse "leyes" en el sentido clásico. Así pues, los métodos *ab initio* no se ajustan ni al modelo de explicación DN ni al causal. En el caso de la explicación DN hay incluso una doble falla. No se dan ni la parte deductiva ni la nomológica de la explicación. En este punto, incluso aquellos químicos que se mostraban reacios a admitir que el enfoque de la mecánica molecular tiene alguna pertinencia explicativa se enfrentan con un *tu quoque*. El modelo al que son favorables, el enfoque químico cuántico, es igualmente inútil para producir explicaciones en los

sentidos requeridos por cualquiera de las dos descripciones consideradas aquí. Este último resultado también discrepa de la manera en que el enfoque *ab initio* se juzga en la práctica.

Así, desde la perspectiva de cualquiera de las dos descripciones principales y ampliamente aceptadas de la explicación científica, los químicos no ofrecen explicaciones propias de uno de sus conceptos más centrales, el de estructura molecular. Estas descripciones clásicas de explicaciones científicas eran parte de una línea general de la filosofía de la ciencia que identificaba la búsqueda de explicaciones científicas como una de las tareas más importantes de la ciencia en general (véase, por ejemplo, Nagel, 1961). Por tanto, tomando en serio estas descripciones, parece que hemos vuelto a Kant, quien sostenía que buena parte de la química, si no la totalidad, no merece clasificarse como ciencia (Kant, 1984). Hemos llegado por fin a un punto en el que queda claro que la filosofía de la ciencia, aunque haya surgido de la escuela positivista antimetafísica de principios del siglo XIX, a veces comparte la *Weltfremdheit* que criticaba en sus predecesores.

En mi opinión, las consideraciones que he expresado muestran que esta postura es contraproducente. La química *es* una ciencia. Los químicos *sí* explican las estructuras moleculares. Al menos eso es lo que creen. ¿Y quién podría saberlo mejor que ellos? Si tomamos lo anterior como punto de partida, parece que tenemos que revisar la descripción filosófica de la explicación científica. Como he argumentado en otra parte, un buen punto de partida es el modelo pragmático de explicación de Van Fraassen (1977). [21] Según esta descripción, las explicaciones son respuestas a preguntas de "¿por qué…?" Lo que debe considerarse pertinente a una de estas preguntas depende de su marco pragmático. Depende del contexto en que se hizo la pregunta y de los intereses de quien la hizo. Esto parece prometedor para la situación de la química. Qué método de modelización molecular elegir depende del tamaño de la molécula y de los distintos aspectos que nos interesan de ella. Cada modelo responde a relaciones de pertinencia que especifican cómo responder a una pregunta de por qué. Si nos preguntaran sobre la estructura de una molécula grande, usaríamos un modelo de mecánica molecular para dar una respuesta apropiada. Los aspectos estructurales de la pequeña molécula de metano se responden mejor recurriendo al enfoque *ab initio*. Nye ha ilustrado muy bien este aspecto pragmático de la elección de modelos del químico:

> Hoffmann y Laszlo han propuesto que la química se asemeja más a la música que a las matemáticas en su renuncia al rigor deductivo. Para "representar" o "explicar" una molécula, como la del alcanfor, por ejemplo, el químico puede recurrir a distintas representaciones […] Cualquiera de estas figuras, o un modelo de bolas y palos, un modelo de relleno espacial, o un modelo de distribución electrónica, puede ser el más apto para el caso. ¿Cuál de estas representaciones […] es la correcta? ¿Cuál es la molécula? […] Todos ellos son modelos, representaciones idóneas para algunos fines y no para otros […]
>
> Como la serie de tallas de madera titulada *Treinta y seis vistas del monte Fuji* (o como los múltiples cuadros de la catedral de Ruán de Claude Monet), no hay una respuesta o explicación rigurosa de la "naturaleza" de una molécula [1994, p. 279].

Cómo se estructura la relación de pertinencia representada por nuestro modelo, si es

deductiva, probabilística o causal, no importa. Dicho esto, también me parece que el modelo de Van Fraassen es demasiado liberal a este respecto. Recuérdese que los químicos no consideran explicativos los modelos de redes neuronales. En la descripción original de Van Fraassen no hay manera de descartar tales ejemplos. Además de los criterios de evaluación que él ofrece, hay que introducir otros. Éstos permitirían la evaluación comparativa de diferentes relaciones de pertinencia de explicaciones del mismo tipo de *explanandum*. En términos generales, lo que tiene validez es, ante todo, cuántas moléculas podrían tratarse de manera satisfactoria con el modelo correspondiente (el *alcance descriptivo* del modelo con respecto al tipo concreto de *explanandum*) y, en segundo lugar, en cuántas preguntas sobre distintos tipos de *explananda* podría recurrirse con éxito al modelo (esto se ha llamado aspecto "unificador de tipos").

Tomando en cuenta lo anterior, el modelo de redes neuronales parece a todas luces inferior a los otros dos modelos tratados. Esto se debe a que la relación de pertinencia representada por este modelo de la inteligencia artificial es muy limitada. Sólo puede usarse para encontrar respuestas a preguntas sobre aspectos estructurales específicos (p. ej., la pauta de plegamiento) de una clase concreta de moléculas (las proteínas). Los modelos de la mecánica molecular y *ab initio* corren mejor suerte en este aspecto. Sin embargo, aplicar tales criterios a una comparación de estos dos últimos modelos da lugar a un empate. Los modelos de la mecánica molecular permiten un alcance descriptivo mucho más amplio que los modelos *ab initio* si lo que se requiere son explicaciones de la estructura de una molécula. Los modelos *ab initio*, por otra parte, permiten un grado mucho mayor de unificación de tipos; posibilitan al químico formular preguntas no sólo sobre propiedades estructurales, sino sobre casi todas las demás clases de propiedades físicas de una molécula en general. Considero que esta conclusión refleja muy bien el carácter pragmático de las explicaciones químicas. Qué explicación preferir depende del esquema de ponderación que se aplique a estos criterios. Para el químico típico, el "voyerista de moléculas" como dice Hoffmann (1995), el alcance descriptivo puede ser más importante que para el químico teórico. A este último, en cambio, quizá le interese más que su modelo pueda explicar correctamente una gran variedad de propiedades físicas, aunque sólo de un número muy reducido de moléculas pequeñas. No hay manera *a priori* de considerar correcta una u otra preferencia. Como dije al principio, los físicos y los químicos no sólo tienen distintos puntos de partida, sino que corren distintas carreras. De cuál carrera se trata y cuáles son las reglas no es asunto tanto de la filosofía de la ciencia como de la misma práctica científica.

BIBLIOGRAFÍA

Allinger, N. L., "Conformational Analysis. 130. MM2. A Hydrocarbon Force Field Utilizing V_1 and V_2 Torsional Terms", *Journal of the American Chemical Society*, vol. 99, núm. 25, 1977, pp. 8127-8134.

Bowen, J. P., y Allinger, N., "Molecular Mechanics: The Art and Science of Parameterization", en K. B. Lipkowitz y D. B. Boyd (eds.), *Reviews in Computational Chemistry*, vol. 2,VCH Publishers, Nueva York, 1991.

Boyd, B., "Aspects of Molecular Modeling", en K. B. Lipkowitz y D. B. Boyd (eds.), *Reviews in Computational Chemistry*, John Wiley & Sons, Nueva York, 1990.

Burkert, U., y N. Allinger, *Molecular Mechanics*, American Chemical Society, Washington, D. C., 1982.

Cartwright, N., *How the Laws of Physics Lie*, Oxford University Press, Nueva York, 1983.

Chandonia, J.-M., y M. Karplus, "Neural Networks for Secondary Structure and Structural Class Prediction", *Protein Science*, núm. 4, 1995, pp. 275-285.

Christen, H. R., y F. Vögtle, *Organische Chemie*, vol. 1, Salle & Sauerlander, Fráncfort, 1988.

Churchland, P. M., *A Neurocomputational Perspective: The Nature of Mind and the Structure of Science*, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1989.

Coffa, J. A., "Hempel's Ambiguity", *Synthese*, vol. 28, núm. 2, 1974, pp. 141-163.

Comba, P., y T. W. Hambley, *Molecular Modeling*, VCH, Weinheim, 1995.

Dirac, P. A. M., "Quantum Mechanics of Many-Electron Systems", *Proceedings of the Royal Society of London*, serie A, vol. 123, Londres, 1929, pp. 714-733.

Dowe, P., "Wesley Salmon's Process Theory of Causality and the Conserved Quantity Theory", *Philosophy of Science*, vol. 59, núm. 2, 1992, pp. 195-216.

Duhem, P., *The Aim and Structure of Physical Theories*, traducción de P. P. Wiener, Princeton University Press, Princeton, 1991.

Gasteiger, J., y J. Zupan, *Neural Networks in Chemistry*, John Wiley & Sons, Weinheim, 1993.

Goodman, N., *Fact, Fiction, and Forecast*, Bobbs-Merrill, Indianápolis, 1956.

Hehre, W. J., J. Radom, P. R. Schleyer y J. A. Pople, *Ab initio Molecular Orbital Theory*, John Wiley & Sons, Nueva York, 1986.

Hempel, C. G., *Aspekte wissenschaftlicher Erklärung*, De Gruyter, Berlín, 1977.

———, y P. Oppenheim, "Studies in the Logic of Explanation", *Philosophy of Science*, vol. 15, núm. 2, abril de 1948, pp. 135-175.

Hoffmann, R., *The Same and Not the Same*, Columbia University Press, Nueva York, 1995 [versión en español: *Lo mismo y no lo mismo*, FCE, México, 1997].

Hunger, J., S. Beyreuther, G. Huttner, K. Allinger, U. Radelof y L. Zsolnai, "How to Derive Force Field Parameters by Genetic Algorithms? – Modelling Tripod-$Mo(CO)_3$ Compounds as An Example", *European Journal of Inorganic Chemistry*, 1998, pp. 693-702; *Journal of Computational Chemistry*, vol. 20, 1999, pp. 445-471.

Janoschek, R., G. Diercksen y H. Preuss, "Wellenmechanische Absolutrechnungen an Molekülen und Atomsystemen mit der SCF=MO=LC(LCGO) Methode/VI. Das Methan (CH_4)", *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 1, núm. 4, 1967, pp. 373-378.

Jorgensen, W. L., y J. Tirado-Rives, "The OPLS Potential Functions for Proteins. Energy Minimization for

Crystals of Cyclic Peptides and Crambin", *Journal of the American Chemical Society*, núm. 110, 1988, pp. 1657-1666.

Kant, I., *Metaphysische Anfangsgründe der Naturwissenschaft*, Harald Fischer Verlag, Berlín, 1984.

King, R. D., "Prediction of Secondary Structure", en M. J. Steinberg (ed.), *Protein Structure Prediction – A Practical Approach*, Oxford University Press, Oxford, 1996.

Kitcher, P., "Explanatory Unification and the Causal Structure of the World", en P. Kitcher y W. C. Salmon (eds.), *Scientific Explanation (Minnesota Studies in the Philosophy of Science*, vol. 13), University of Minnesota Press, Minneapolis, 1989.

Kunz, R. W., *Molecular Modelling für Anwender*, Teubner Verlag, Stuttgart, 1991.

Lewis, D., "Causation", *Journal of Philosophy*, vol. 70, núm. 17, 1973, pp. 556-567.

Müller-Herold, U., y H. Primas, *Elementare Quantenchemie*, Teubner Verlag, Stuttgart, 1984

Nagel, E., *The Structure of Science*, Routledge & Kegan Paul, Londres, 1961.

Nye, M. J., *From Chemical Philosophy to Theoretical Chemistry. Dynamics of Matter and Dynamics of Disciplines 1800-1950*, University of California Press, Berkeley, 1993.

Quian, N., y T. Sejnowski, "Predicting the Secondary Structure of Globular Proteins Using Neural Network Models", *Journal of Molecular Biology*, vol. 202, núm. 4, 1988, pp. 865-884.

Rappé, A. K., y C. J. Casewit, *Molecular Mechanics Across Chemistry*, University Science Books, Sausalito, California, 1997.

Redhead, M., "Models in Physics", *The British Journal for the Philosophy of Science*, vol. 31, núm. 2, 1980, pp. 145-163.

Salmon, W. C., "A Third Dogma of Empiricism", en R. E. Butts y J. Hintikka (eds.), *Basic Problems in Methodology and Linguistics*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1977.

———, "Causality: Production and Propagation", en P. D. Asquith y R. Giere (eds.), *Proceedings of the Biennial Meeting of the Philosophy of Science Association, 1980*, vol. 2, Asociación para la Filosofía de la Ciencia, East Lansing, Michigan, 1981, pp. 49-69.

———, "Causality Without Counterfactuals", *Philosophy of Science*, vol. 61, núm. 2, 1984, pp. 297-312.

Salmon, W. C., *Causality and Explanation*, Oxford University Press, Nueva York, 1998.

Sklar, L., *Physics and Chance: Philosophical Issues in the Foundations of Statistical Mechanics*, Cambridge University Press, Nueva York, 1993.

Van Fraassen, B. C., "The Pragmatics of Explanation", *American Philosophical Quarterly*, vol. 14, núm. 2, 1977, pp. 143-150.

Whitehead, A. N., *Process and Reality*, The Macmillan Company, Nueva York, 1929.

Woodward, J., "Data and Phenomena", *Synthese*, 1989, vol. 79, núm. 3, pp. 393-472.

Woolley, R. G., "The Molecular Structure Conundrum", *Journal of Chemical Education*, vol. 62, núm. 12, 1985, p. 1082.

———, y B. T. Sutcliffe, "Molecular Structure and the Born-Oppenheimer Approximation", *Chemical Physics Letters*, vol. 45, núm. 2, 1977, pp. 393-398.

---

[*] The Boston Consulting Group, Chilehaus A, Fischertwiete 2, 20095 Hamburgo, Alemania.

[1] En el texto original de Nietzsche, la palabra traducida como "concepción" en "hemos perfeccionado la

concepción […], pero no hemos averiguado lo que hay detrás ni más allá de la concepción" es *Bild*, que literalmente significa "imagen" o "cuadro".

[2] En los albores de los cálculos *ab initio* era imposible incluso una optimización tan local. Para calcular la estructura de una molécula tan simple como el metano, Janoschek *et al*., en su obra precursora, tuvieron que usar el análisis de regresión para determinar el mínimo más próximo en la superficie de B.-O. Se calcularon sólo cuatro puntos estacionarios en la hipersuperficie de B.-O., situados en torno de las distancias C-H observadas experimentalmente, y se tomó como resultado el mínimo de la curva de regresión (Janoschek *et al*., 1967). Esto ilustra de nuevo que el éxito de un cálculo *ab initio* depende en gran medida de estructuras iniciales determinadas empíricamente.

[3] Un principio general es que sólo las moléculas que contienen menos de 100 átomos pueden tratarse con modelos *ab initio;* véase, por ejemplo, Boyd, 1990.

[4] Sobre enfoques de parametrización clásicos véase, por ejemplo, Bowen y Allinger, 1991. Sobre el uso de un método de optimización global para la parametrización de campos de fuerza, véase Hunger *et al*., 1998.

[5] Véase, por ejemplo, Burkert y Allinger: "Cabe preguntar en este punto por qué debe interesarnos calcular las estructuras y las energías de las moléculas, ya que éstas pueden determinarse por métodos experimentales. La respuesta es por lo menos doble. *En primer lugar está la cuestión del entendimiento*. Un método de cálculo que da buenos resultados contiene en sí un potencial de entendimiento que no proviene de un conjunto de resultados experimentales" (1982, p. 9; las cursivas son mías).

[6] El diagrama de Hinton es una representación gráfica de la matriz de pesos de la red.

[7] El ejemplo clásico es una oración como "Todos los hombres sentados en el banco *x* del parque son valientes". Hempel se mantiene reacio a especificar lo que merece considerarse una verdadera ley científica y más adelante alude al criterio de Goodman de la proyectabilidad de los predicados como condición necesaria para una ley científica apropiada (Goodman, 1956).

[8] Más adelante, influido por la crítica de Dowe, Salmon revisó su teoría y ahora sostiene que el criterio de validez de un proceso causal es su capacidad para transmitir una cantidad moderada (Salmon, 1994). Para aplicar el criterio a nuestro ejemplo, los prisioneros de la cueva, anticipando el advenimiento de la física moderna dos mil años después, habrían tenido que medir la energía total del enemigo fantasmagórico en los momentos t_1 y t_2 para averiguar si era o no era un proceso causal real.

[9] Hay que aclarar, sin embargo, que otra descripción de la explicación, el modelo de activación de pautas de Churchland, se refiere explícitamente a redes de retropropagación tan prometedoras como los modelos cognitivos de procesos de explicación (1989, p. 205). Analizo la notable tensión entre científicos de disciplinas aplicadas y científicos cognitivos respecto al valor explicativo de las redes neuronales en mi trabajo *Why Churchland's Model of Explanation Does Not Explain* (manuscrito sin publicar).

[10] Véase, por ejemplo, Comba: "Aislados, los parámetros de campos de fuerza suelen ser de poca utilidad. Un conjunto de parámetros de campos de fuerza es confiable sólo en conjunto y asociado a un conjunto especificado de funciones potenciales de energía" (1995, p. 12). Al respecto, *cf*. también Bowen y Allinger (1991), y Kunz (1991).

[11] Lo mismo se aplica, aunque de diferente forma, a un procedimiento de dinámica molecular. Los elementos aleatorios aquí son el punto de partida y las velocidades iniciales de los átomos. De elección más o menos arbitraria es el tamaño de los intervalos de tiempo Δt.

[12] La palabra "real" es importante, porque se podría objetar que el hecho de que los mínimos son estables en realidad *se deduce* de la mecánica estadística, y que la búsqueda conformacional no es otra cosa que un

vehículo para encontrar estos mínimos. La búsqueda no afecta el carácter deductivo de la inferencia. (Doy las gracias a Ansgar Beckermann por esta objeción.) Sin embargo, esta perspectiva es errónea. Lo que afirmo es que, para averiguar el significado del término "explicación", hay que examinar con detenimiento lo que los científicos *hacen realmente* cuando explican. En el caso de la mecánica molecular no infieren, *buscan*.

[13] Desde luego, podemos recurrir a una solución analítica capaz de reproducir el estado del sistema en cualquier *instante* en el tiempo. Para calcular toda una trayectoria, sin embargo, estamos limitados por el enfoque mencionado de acumulación gradual.

[14] Aquí me atengo deliberadamente al modelo de la mecánica molecular. Como todos sabemos, desde el punto de vista de la física cuántica el proceso de absorción e intercambio de energía de una molécula es en realidad irreductiblemente discreto. Sin embargo, Salmon admite sin reserva el hecho de que la física cuántica plantea algunos problemas graves para la descripción de procesos de causalidad.

[15] Esta línea de crítica se asemeja a la crítica planteada por Kitcher (1989). Como señaló éste con el ejemplo de marcar un proyectil con gis, se producen muchas interacciones entre la marca y las moléculas del aire. Sin embargo, el ejemplo antes descrito es interesante en la medida en que también se aplica a la objeción que Salmon opuso a la crítica de Kitcher y que, a grandes rasgos, sostenía que el criterio de transferencia de marca sería aplicable, aun así, cuando el proceso se dividiera en partes microscópicas (Salmon, 1994). Sin embargo, tratándose de una reacción química se puede alcanzar el nivel microscópico que se desee. Con todo, el señalamiento de Kitcher sigue siendo válido.

[16] Ya mencioné el grave problema de disponer de una medida apropiada de la semejanza entre dos mundos. Aquí doy por sentado, conforme a Lewis, que la diversidad de los hechos tiene menos peso que la diversidad de las leyes. Por tanto, el mundo posible más cercano a M_1 en el que A es cierto es un mundo donde tiene que cambiarse el menor número necesario de hechos para hacer que A sea cierto. Se trata simplemente del mundo donde se conserva la disposición geométrica de los átomos, pero un átomo es alterado por la masa de un neutrón.

[17] Véase, por ejemplo, Rappé y Casewit, 1997: "Una descripción correcta de 'la' estructura molecular [...] de una molécula de varias conformaciones debe incluir una ponderación adecuada de todas las conformaciones [...] La mecánica estadística ofrece la ecuación de Boltzmann, que se usa para obtener la probabilidad o población de cada conformación" (p. 22).

[18] En efecto, como ya se dijo, el enfoque dinamicomolecular ni siquiera es parte necesaria de tal *explanans*, sino tan sólo uno de los muchos algoritmos que pueden usarse para superar el delicado problema de encontrar la conformación energéticamente más favorable (p. ej., Monte Carlo, búsqueda por cuadrícula o algoritmos genéticos).

[19] Woodward (1989) ha expresado una idea muy similar.

[20] Un ejemplo común es una obra antes citada, donde la modelización de la estructura de la molécula de metano no se usa para validar el enfoque de la química cuántica, sino para probar cuántas funciones de base fijas son suficientes a fin de obtener un resultado correcto (Janoschek *et al*., 1967). Al respecto, *cf*. también Nye: "La mecánica cuántica brindó una nueva compresión del mundo químico, pero fue una comprensión completamente dependiente de hechos puramente químicos ya conocidos. Lo que posibilitó al teórico obtener desde el principio la solución correcta en un conjunto de cálculos fueron los hechos experimentales de la química, los cuales, como escribió Coulson, 'implican ciertas propiedades de la solución de la ecuación de onda, de manera que pudiera decirse que la química resolvía a los matemáticos el problema, y no a la inversa' " (1993, p. 277).

[21] Véase Hunger, "The Chemistry of Pragmatics – Van Fraassen's Model of Explanation Reconsidered", manuscrito sin publicar.

VIII. LA ÉTICA PROFESIONAL EN LA CIENCIA

JEFFREY KOVAC[*]

Introducción

En 1982, William Broad y Nicholas Wade publicaron un libro titulado *Betrayers of the Truth: Fraud and Deceit in the Halls of Science* ("Traidores a la verdad: Fraude y engaño en los salones de la ciencia"), que atrajo ampliamente la atención pública hacia el problema de la ética en la ciencia (Broad y Wade, 1982). Mucho se ha escrito desde entonces sobre ética científica, incluido un informe en dos volúmenes de la Academia Nacional de Ciencias estadunidense (Panel on Scientific Responsibility and the Conduct of Research, 1992, 1993). Aunque la mayor parte del escrutinio público se ha centrado en incidentes de mala conducta en las ciencias biomédicas, algunos autores han empezado a estudiar la ética en las ciencias físicas (Dyson, 1993; Coppola y Smith, 1996; Kovac, 1996, 1998, 1999, 2000, 2001; Coppola, 2000). En este capítulo esbozo una teoría de la ética científica con base en dos supuestos. En primer lugar, la ética científica es un subconjunto de la ética profesional: las reglas de conducta especiales que deben observar quienes se dedican a una de las actividades tradicionalmente llamadas profesiones (Callahan, 1988). En consecuencia, el entendimiento de la ética científica requiere el entendimiento de la ciencia como profesión (Davis, 1998). En segundo lugar, la ética es parte integrante de la ciencia. Surgen dudas éticas como parte natural de la práctica cotidiana interna de la ciencia y en la relación entre ésta y la sociedad. A un nivel más profundo, argumentaré que la epistemología y la ética están tan estrechamente interrelacionadas que la racionalidad científica depende de la calidad moral de los científicos. Como soy un químico cuya investigación científica se encuentra en la interfaz entre física y química, centraré la atención en las ciencias físicas, en especial la química.

Está claro que no es posible desarrollar por completo una teoría de la ética profesional en un capítulo corto. Mi objetivo es bosquejar la teoría a grandes rasgos planteando lo que me parecen las cuestiones más importantes y ofreciendo una discusión preliminar de cada una.

Para empezar, debemos distinguir entre tres acepciones de la palabra "ética". El significado primero y más general es el de moral común y corriente: aquellas reglas de comportamiento más o menos universales a las que esperamos que obedezca toda persona racional. Las normas de la moral común son tan ampliamente compartidas que forman un acuerdo social unánime y estable (Bok, 1995; Beauchamp y Childress, 2001). La moral común puede resumirse en relación con principios morales fundamentales que expresan los valores generales subyacentes a reglas más específicas que rigen el comportamiento. Entre estos principios morales se incluyen el respeto a la autonomía, la no maleficencia (evitar hacer daño), la beneficencia (dar beneficios), la justicia (la distribución equitativa de bienes y servicios) y otros. Las reglas morales son guías más específicas de la conducta, que pueden expresarse en forma negativa ("No mientas") o positiva ("Di la verdad") (Gert, 1988). Las reglas (y las excepciones permisibles) de la moral común se aprenden de los padres, ministros religiosos, maestros y otras personas que influyen sobre nosotros durante nuestra formación hasta la edad adulta. Podemos suponer que casi todos los científicos tienen un sentido bien desarrollado de la moral común.

El segundo significado de ética es el de teoría de la ética, una rama de la filosofía. La teoría de la ética es el intento de insertar la moral común en un marco sistemático (Beauchamp, 1991; Rachels, 1999). Una teoría de la ética se parece a una teoría científica, pero hay diferencias. Una teoría científica debe ofrecer alguna explicación de una clase de fenómenos naturales. Una teoría de la ética es una presentación sistemática de los componentes básicos de la ética, derivados de un conjunto integral de principios que deben proporcionar las razones últimas de las decisiones morales. Los "hechos experimentales" de una teoría de la ética son lo que William Gass llama "casos claros", comportamientos que sin duda son correctos o incorrectos (Gass, 1980). Algunas acciones, como la tortura o el abuso de niños, son tan a todas luces malas que consideraríamos moralmente defectuosa a la persona que las consintiera y rechazaríamos cualquier principio moral que las aprobara. Una teoría de la ética debe explicar estos hechos, pero también es prescriptiva de un modo en que la teoría científica no puede serlo.

El tercer sentido, el que nos interesa en este capítulo, es el de la ética profesional. La ética profesional son las reglas de conducta especiales a las que se sujetan quienes se dedican a actividades comúnmente llamadas profesiones, como el derecho, la medicina, la ingeniería y la ciencia. La ética profesional es específica. La ética jurídica se aplica sólo a los abogados (y a nadie más); la ética científica se aplica sólo a los científicos. La ética profesional rige las relaciones entre los profesionales y entre ellos y la sociedad. En muchos casos establece un modelo de conducta superior al que se espera del común de la gente, pero debe ser consecuente con la moral común y con las teorías de la moral pertinentes.

En años recientes ha habido un enorme interés en la ética profesional, estimulado

principalmente por las complicadas interrogantes éticas planteadas por la medicina moderna (Beauchamp y Childress, 2001). Tras el escándalo de Watergate la ética jurídica pasó a ocupar un lugar más prominente en la carrera de derecho, y los recientes cambios de las normas de la ABET [Accreditation Board for Engineering and Technology] para acreditar los planes de estudios de ingeniería han redundado en un intenso trabajo académico en ética de la ingeniería (Davis, 1998; Harris, Pritchard y Rabins, 1995). Los científicos se han quedado a la zaga de las demás profesiones en comprender la importancia de la ética en su actividad, pero hay señales de que esta actitud de descuido está cambiando (Resnik, 1998; Kitcher, 2001).

Aunque hay varias maneras de entender la ciencia, yo he encontrado que verla como una profesión es la manera más útil de comprender su ética. Si bien los científicos no tienen la autonomía de quienes ejercen las profesiones liberales clásicas, como médicos y abogados, en el último siglo los integrantes de determinadas disciplinas científicas, incluida la química, llegaron a considerarse a sí mismos profesionales y se han organizado en agrupaciones para proteger sus intereses gremiales y promover el trabajo académico (Knight y Kragh, 1998). Por ejemplo, es indudable que la American Chemical Society considera profesionales a los químicos, pues promulga normas para el ejercicio de la actividad y protege los intereses de sus miembros. Aunque no se pueda considerar a la ciencia en general una profesión independiente, las disciplinas particulares, en especial la química, son sin duda mejores ejemplos. No obstante que a los científicos se les podría ver como "cautivos" en comparación con los profesionales autónomos, muchas otras profesiones, incluidas la medicina, el derecho y la ingeniería, las ejercen individuos empleados por organizaciones mayores. En la siguiente sección esbozaré el concepto de profesión y mostraré que la ciencia se ajusta razonablemente bien al modelo.

Una profesión es más que un grupo de personas dedicadas a una ocupación común; procede de dos acuerdos o contratos: uno interno y uno externo. El acuerdo interno rige las relaciones entre los miembros de la profesión, mientras que el externo define la relación de la profesión con la sociedad. Las profesiones se desarrollan mediante un proceso histórico de autodefinición. Por ejemplo, aunque la química es una ciencia antigua que nació con las artesanías de metalistería, cerámica, teñido y curtido, en realidad empezó a definirse como ciencia independiente en el siglo XVIII y maduró hasta convertirse en un campo independiente totalmente reconocido a mediados del XIX, cuando los químicos comenzaron a organizar sociedades científicas (Brock, 1992; Knight, 1992). La American Chemical Society (ACS) fue fundada en 1876 por un grupo de químicos neoyorquinos que habían asistido a la primera conferencia estadunidense de químicos en Northumberland, Pensilvania, celebrada en 1874 para conmemorar que cien años antes Joseph Priestley había aislado y descrito el oxígeno (Reese, 1976). La ACS se concibió al principio como sociedad científica, no profesional. Su propósito principal era fomentar la investigación celebrando conferencias científicas y editando publicaciones periódicas, aunque también dedicó cierta atención a la formación de estudiantes y al mejoramiento de la imagen pública de la química. El profesionalismo se volvió un interés expreso de la ACS en los años treinta del siglo XX debido en buena medida a las presiones económicas de la Gran Depresión. Entre otras acciones, las ACS desarrolló las normas de un grado "aprobado" en química análogo a los de medicina y derecho (Committee on Professional Training, 1999). En parte a causa del gran número de químicos empleados por la industria privada, el profesionalismo es un interés constante de la ACS. De hecho, hay un grado considerable de tensión en la agrupación entre los intereses de los científicos industriales y los de los académicos.

Durante el siglo XIX se fundaron en Europa organizaciones parecidas de químicos. En Inglaterra, la Chemical Society se fundó en 1841, y la Faraday Society, que habría de ser un puente entre la ciencia y la tecnología, en particular la electroquímica, surgió en 1902. La Deutsche Chemische Gesellschaft se fundó en Berlín en 1867 según el modelo británico. En 1900 los químicos estaban bien organizados en el plano internacional. Es posible remontarse a ejemplos similares en las demás ciencias (Knight y Kragh, 1998).

Las diversas ciencias difieren de las profesiones liberales clásicas, la medicina y el derecho, en que se centran menos en el cliente. Los científicos no abren despachos ni consultorios para ejercer de forma independiente, pero conforme las distintas disciplinas, y a veces subdisciplinas, han madurado, han ido desarrollando un código interno de práctica análogo a los de las profesiones liberales, así como una identidad profesional.

Como parte del proceso de autodefinición, los miembros de una profesión deben acordar un código interno de práctica y negociar las relaciones entre la profesión y la sociedad. El acuerdo interno consta de varias partes: requisitos de educación y formación, un procedimiento formal o informal de certificación o licenciatura, y un código de práctica, que puede incluir un código ético formal. Algunas profesiones, como el derecho, la medicina y la ingeniería, tienen requisitos de educación bien definidos, exigidos por organismos de acreditación. En la ciencia, los requisitos son más informales, aunque la ACS tiene el Committee on Professional Training, que establece la normativa de un grado de bachillerato profesional (Committee on Professional Training, 1999). La química es la única disciplina científica que cuenta con un grado profesional expreso inferior al de licenciatura. Aunque otras disciplinas no tienen normas formales escritas, hay un notable acuerdo informal sobre lo que constituye una educación aceptable en cualquier campo científico. Este acuerdo se hace patente examinando una selección de catálogos universitarios y el contenido de los libros de texto usados para enseñar los diversos cursos.

Los niveles de formación en ciencia han evolucionado con el paso de los años, pero actualmente el requisito habitual para alcanzar rango profesional en la mayoría de los campos es un grado de doctorado otorgado por una universidad acreditada. Sin embargo, los científicos sin doctorado pueden obtener reconocimiento una vez que han publicado una investigación digna de crédito, en una publicación periódica sujeta a revisión ínter pares. La certificación formal no es común en las ciencias, por lo que el reconocimiento proviene sobre todo de los logros y no de un título profesional. Hay algunas excepciones, como la química clínica, sobre todo en campos estrechamente asociados con la medicina.

Se han hecho varios intentos de formular el código interno de práctica de la ciencia. Quizá el más famoso sea el de Robert K. Merton (1973). Este autor identificó cuatro principios de la práctica científica:

i) Universalismo: las pretensiones de verdad deben evaluarse con criterios impersonales preestablecidos.

ii) Comunismo (otros autores prefieren el término comunalismo): es la obligación de divulgar los hallazgos científicos. La ciencia es un conocimiento público (Ziman, 1968).

iii) Desinterés: el progreso de la ciencia es más importante que los intereses personales del científico.

iv) Escepticismo organizado: toda verdad científica es provisional y debe juzgarse sólo con base en las pruebas disponibles. Las conclusiones científicas siempre están sujetas a revisión. (Lo anterior se parece al famoso principio de falsificabilidad de Popper [1965].)

Autores posteriores han modificado la lista de Merton y la han ampliado con otras

ideas, como objetividad, honestidad, tolerancia, incertidumbre, altruismo, individualismo, racionalidad y neutralidad emocional (Barber, 1952; Cournand y Meyer, 1976; Zuckerman, 1977).

Los principios de Merton son análogos a los grandes principios morales ya mencionados, como la justicia. Constituyen la base de reglas morales más específicas que rigen la práctica cotidiana de la ciencia. Entre las reglas más prácticas se cuentan:

i) Los procedimientos experimentales y teóricos deben comunicarse con exactitud para que investigadores independientes puedan reproducir el trabajo si así lo desean.

ii) Los datos de que se informa deben ser correctos y estar completos, y se deben señalar los márgenes de error. Los científicos no deben suprimir los datos que no concuerdan con sus expectativas.

iii) Los datos deben interpretarse objetivamente. Las esperanzas previas no deben interferir en el análisis de los datos, ni deben influir en el análisis factores no científicos, como la política o las expectativas de la institución financiadora.

iv) Deben darse los créditos correspondientes. Se espera que los científicos citen los trabajos anteriores cuando sea pertinente y mencionen los nombres de quienes han colaborado en la investigación. A la inversa, se da por cierto que todos quienes figuran como autores de un trabajo científico han colaborado en la investigación.

En tiempos recientes Resnik (1998) dio una lista más larga, pero parecida, de principios éticos de la ciencia.

Además de estas normas, hay prácticas de investigación más específicas que pueden variar según la disciplina. Algunos de los criterios que distinguen a la “buena física” difieren bastante de los de la “buena biología”. El aprendizaje de las técnicas y las normas de investigación de una disciplina en particular es parte importante de la educación de posgrado de un científico. Es lo que Thomas Kuhn llamó *ciencia normal* (1962).

Es importante reconocer que el código interno de la ciencia ha evolucionado con el tiempo. Mientras que los grandes principios del código se remontan a los albores de la Real Sociedad de Londres para el Avance de la Ciencia Natural, algunos detalles y normas específicos de la práctica científica han cambiado considerablemente desde los días de Boyle y Newton (Holton, 1994). Por tanto, las recientes acusaciones de fraude científico contra personajes históricos deben tomarse con cierto escepticismo.

A cierto nivel, el código interno de práctica de una ciencia puede considerarse una mera convención social. Sin embargo, a un nivel más profundo tiene implicaciones tanto éticas como epistemológicas. En varios artículos, John Hardwig (1985, 1991, 1994) argumentó que en la ciencia (y en otros campos) la epistemología y la ética están íntimamente relacionadas. Yo, como químico, afirmo saber cosas de química y de otras ciencias, algunas de las cuales no he estudiado yo mismo. En ciertos casos no tengo la experiencia o la capacidad para seguir en detalle los argumentos que establecieron el conocimiento que reclamo como propio. Como dice Hardwig, creo que muchas cosas son ciertas sencillamente porque confío en que los científicos que las dan a conocer hicieron los experimentos o los cálculos teóricos pertinentes y los interpretaron de manera correcta; acepto su testimonio como verdad. En consecuencia, mi conocimiento depende de la calidad moral de otros científicos. Aunque pienso que todos los científicos sobrentienden cuánto depende nuestro conocimiento de la integridad de los demás, este asunto rara vez se discute.

El análisis de Hardwig se basa en la idea de la dependencia epistémica. Los científicos dependen unos de otros para obtener conocimiento, lo que da lugar a una relación de poder desigual; una persona se convierte en "experto" y la otra en "lego". Ambas tienen responsabilidades éticas. Los expertos deben tener cuidado de lo que dicen y los legos de evaluar y usar la información que reciben. Además, la comunidad de expertos tiene la responsabilidad ética de garantizar que sus miembros se conduzcan responsablemente. Hardwig presenta un conjunto preliminar de máximas que explican la ética de la pericia técnica. Estas máximas están organizadas en cuatro categorías: para expertos, para quienes dependen de expertos, para la comunidad de expertos y para una sociedad o grupo que depende de expertos. Muchas de estas máximas son consecuentes con el código interno informal de la práctica de la ciencia, mientras que otras se refieren a la relación apropiada entre la ciencia y la sociedad. Por ejemplo, entre las máximas para expertos se cuentan las siguientes:

i) No sobrestimes el alcance o la certidumbre de tu conocimiento, ni las inferencias que de él pueden extraerse válidamente.
ii) Di la verdad tal como la ves según tu juicio profesional, aunque tengas que decir a tus empleadores, clientes o quienes ocupan puestos de poder cosas que no quieren oír.
iii) Reconoce la tendencia humana a racionalizar.
iv) Conoce tus límites éticos.

Todas estas reglas son parte del código interno de práctica de la ciencia. Como ya se dijo, es esencial que los científicos den a conocer de forma completa los datos que encuentren y que los interpreten objetivamente. Uno de los sutiles peligros éticos de la práctica científica es el autoengaño: malinterpretar o exagerar los datos para que

concuerden con expectativas previas. La historia de la ciencia abunda en ejemplos de autoengaño; el caso de los rayos N y el de la poliagua son dos de los más famosos. Las máximas *i, iii* y *iv* citadas en el párrafo anterior tratan directamente este peligro. La máxima *ii* se relaciona de manera más directa con el principio de escepticismo organizado de Merton. Es de vital importancia que los científicos se digan la verdad entre sí, tal como la ven, aunque ello signifique poner en duda una idea establecida.

Las máximas para la comunidad de expertos también son importantes. Entre ellas se incluyen:

i) Nunca uses premios y castigos para suprimir el disentimiento en el colectivo de expertos.
ii) Toma medidas para garantizar que los miembros sean dignos de la confianza que la sociedad deposita en ellos.
iii) Reconoce la obligación de ser un “delator”.

Desde mi perspectiva, quizá la máxima más importante para la comunidad científica sea la segunda porque resume la esencia del vínculo de confianza que debe existir en el seno del colectivo científico y entre la ciencia y la sociedad, que se discutirá con más detalle en la siguiente sección.

Más allá de los aspectos sociales de la confianza en la ciencia está la cuestión de la confianza en sí mismo. Como tan bien lo ha explicado el químico y filósofo Michael Polanyi, la adquisición de conocimiento es un acto hábil de compromiso personal, el arte de saber: “En esta medida, afirmar algo implica, pues, una evaluación de nuestro arte de saber, y el establecimiento de la verdad empieza a depender decisivamente de un conjunto de criterios personales propios que no pueden definirse de manera formal” (Polanyi, 1964, pp. 70-71).

Aunque Polanyi no lo dice expresamente, entre esos criterios personales deben incluirse las normas éticas. Polanyi refuerza la máxima de Hardwig para expertos: conoce tus límites éticos. Como ya se señaló, dejar de aplicar apropiadamente los principios éticos personales al acto de conocer resultados puede conducir al autoengaño. Cualquier teoría de la ética en la ciencia que no aborde la cuestión de la ética del conocimiento personal en la ciencia sería, a mi juicio, incompleta.

El acuerdo externo se refiere a la relación de la profesión con la sociedad. En general, la profesión reclama derechos sobre un cuerpo de conocimientos y aptitudes especializados no fácilmente asequibles a la mayoría de la gente. A cambio del monopolio del ejercicio de estas aptitudes, la profesión accede a usarlas en servicio de la sociedad y a corresponder emitiendo opiniones profesionales cuando se le piden. En algunas profesiones, como el derecho, la medicina y la ingeniería, el acuerdo con la sociedad está muy estructurado, y en parte incluso codificado en las leyes. En el caso de la ciencia, se trata de un acuerdo más informal. Un breve bosquejo histórico ayudará a aclarar la relación de la ciencia con la sociedad.

Quizá el primer acuerdo entre ciencia y gobierno haya surgido cuando Carlos II de Inglaterra estableció la Real Sociedad de Londres. La agrupación obtuvo el derecho de publicar sin censura y de adoptar la nueva especialidad de la filosofía natural. A cambio, la Real Sociedad debía evitar el estudio de la política, la moralidad y la religión. En palabras de Robert Hooke, la "función y destino" de la sociedad era "aumentar el conocimiento de las cosas naturales y de todas las formas útiles de artes, manufacturas, mecánica, prácticas, máquinas e inventos experimentales (sin intervenir en asuntos de la divinidad, metafísica, moral, política, gramática, retórica ni lógica)" (Proctor, 1991, p. 33). Los caballeros que fundaron la Real Sociedad establecieron las primeras normas de práctica científica. La pregunta fundamental era qué debía considerarse verdad científica. Robert Boyle fue una figura central en este desarrollo (Shapin, 1994).

En la Real Sociedad primitiva había una tensión interesante entre lo que hoy llamaríamos ciencia pura y ciencia aplicada, y que se puede ejemplificar con Boyle y Hooke. Mientras que Boyle era el paradigma del caballero científico cristiano, a Hooke, el supervisor de experimentos, se le consideraba "el mayor mecánico del momento en el mundo" (Shapin, 1989). La nobleza desinteresada de Boyle contrastaba marcadamente con la protección de los derechos de propiedad intelectual de Hooke. Aunque ambos eran más complejos de lo que sugiere esta comparación polarizada, la división entre ciencia pura y ciencia aplicada es un asunto fundamental de la política científica, y la tensión entre el ideal científico de comunicación abierta y el lucro personal es un importante problema contemporáneo de ética profesional en la ciencia (Baird, 1997). Si bien los aspectos prácticos de la ciencia siempre han sido importantes, el comúnmente llamado "modelo alemán de investigación pura" fue el tema preponderante en el desarrollo de la ciencia en los Estados Unidos. En las universidades y los institutos de investigación se buscaba la ciencia por la ciencia misma. Ya habría aplicaciones prácticas como consecuencia de revelar los secretos de la naturaleza. La ciencia estadunidense podía señalar destacados ejemplos de la utilidad práctica de la ciencia pura; por ejemplo, el trabajo de Irving Langmuir en General Electric y el de John Bardeen en los Laboratorios Bell.

La segunda Guerra Mundial cambió para siempre la naturaleza de la investigación en los Estados Unidos. El Proyecto Manhattan y el desarrollo del radar demostraron cómo

la ciencia, generosamente subsidiada por el gobierno, podía lograr avances significativos en poco tiempo. El nuevo acuerdo entre ciencia y sociedad se puso de manifiesto en dos informes de la posguerra: *Science: The Endless Frontier*, de Vannevar Bush (1990), y *Science and Public Policy*, de John R. Steelman (1947). Estos informes dieron lugar al actual sistema de financiamiento de la investigación en el país, centrado en la National Science Foundation.

La esencia de este acuerdo puede resumirse en pocas palabras: "El gobierno promete financiar la ciencia básica que los revisores ínter pares consideren más digna de apoyo, y los científicos prometen a cambio que la investigación se realizará adecuada y honestamente, y producirá un flujo constante de descubrimientos que puedan traducirse en productos, medicinas o armas nuevos" (Guston y Keniston, 1994, p. 2).

Aunque en años recientes se ha discutido mucho la idoneidad de esta forma de contrato (Brown, 1992; Guston, 1999), en esencia todos los científicos en ejercicio coincidirían con esta afirmación del acuerdo entre ciencia y sociedad, al menos como ideal.

No hace mucho Donald Stokes desarrolló una manera provocativa y útil de pensar en la ciencia y la sociedad en su libro *Pasteur's Quadrant* (1997). Tradicionalmente hemos concebido la ciencia pura y la aplicada como los dos extremos de un continuo lineal. Stokes señala que este modo de clasificar la ciencia no es ni exacto ni de utilidad particular para pensar en políticas científicas. Gran parte de la ciencia no entra sin dificultad en las categorías de pura o aplicada. Cita como ejemplo la obra de Pasteur. Aunque buena parte de la investigación de Pasteur abordaba preguntas fundamentales de lo que ha llegado a llamarse microbiología, estaba motivada por problemas muy prácticos planteados por la medicina o por la industria francesa. Para explicar su "investigación básica motivada por el uso", Stokes desarrolló un esquema bidimensional de clasificación. Un eje clasifica la investigación con base en si se centra o no en preguntas científicas fundamentales. El segundo eje pregunta si la investigación está motivada por un uso o aplicación bien definido. Los dos ejes delimitan cuatro cuadrantes. El primero, al que Stokes llama cuadrante de Bohr, comprende la investigación que se centra en el entendimiento fundamental y no tiene utilidad inmediata: la investigación pura clásica. Ejemplos de ella son los trabajos de Bohr sobre mecánica cuántica y estructura atómica. En el cuadrante de Pasteur está la investigación que se centra en el entendimiento fundamental en el contexto de una aplicación bien definida, lo que Stokes llama investigación básica motivada por el uso. El tercer cuadrante, llamado de Edison, corresponde a la investigación aplicada en la que no interesa profundizar nuestro entendimiento fundamental de la naturaleza. Esto es lo que comúnmente se ha llamado investigación aplicada. El cuarto cuadrante, que no tiene nombre, se refiere a la investigación que ni tiene utilidad particular ni está orientada al entendimiento fundamental. Ejemplo de ella podría ser la *Guía de aves de Peterson*, que es una recopilación sistemática de información, esencial para el observador de aves, pero no concebida ni para dar pruebas de las teorías más profundas de la biología ni para satisfacer una necesidad social importante.

El esquema de Stokes es de particular interés porque gran parte de la ciencia contemporánea está firmemente situada en el cuadrante de Pasteur. Como afirman Guston y Keniston, buena parte del financiamiento federal estadunidense para la ciencia se basa en la expectativa de que la investigación dará por resultado productos y procesos útiles. Las propuestas de investigación se juzgan cada vez más por el potencial de aplicabilidad de los resultados, y se anima a los científicos universitarios a que tramiten patentes e inicien empresas pequeñas para comercializar sus descubrimientos. Muchas de las tensiones éticas de la ciencia contemporánea proceden de la insistencia en realizar investigación en el cuadrante de Pasteur.

En cierto nivel, el código interno de práctica y el código ético de una profesión son resultado de un contrato social en el que participan los miembros de la profesión y que la sociedad ratifica de manera tácita o formal. En otro nivel, parece que la ética profesional tiene una fuente más profunda. Al examinar la autoridad de un código profesional, Michael Davis propuso que las profesiones se basan en un ideal moral, un ideal de servicio que va más allá de los requerimientos de la moral y el derecho comunes, y de las exigencias del mercado (Davis, 1987). El ideal moral de los abogados es la búsqueda de la justicia conforme a la ley; el de los médicos, curar a los enfermos, proteger de la enfermedad a los pacientes y confortar a los moribundos. La existencia de un ideal moral se ajusta a la antigua idea de profesión como vocación. Si los miembros de una profesión comparten un ideal moral, entonces el código interno de práctica y el código ético, que se desarrollan a partir de ese ideal, tienen una autoridad que va más allá de la simple convención social y del temor a las sanciones; representan los valores centrales de la profesión.

¿Podemos identificar un ideal moral de la ciencia? Se trata de una pregunta complicada porque la ciencia no es un monolito. La cultura disciplinar y profesional de la química es muy distinta a la de la física o la biología. El ideal moral de un científico académico que trabaja en el cuadrante de Bohr podría diferir del de un científico industrial que trabaja en el cuadrante de Pasteur o el de Edison. Aunque todavía no tengo una respuesta completa, he identificado dos partes importantes de un ideal moral de la ciencia: el hábito de la verdad y el ideal de la economía del regalo.

Como he escrito en otros trabajos, creo que una parte esencial del ideal moral de la ciencia puede encontrarse en el libro de Jacob Bronowski *Science and Human Values*: "el hábito de la verdad" (1956). La ciencia es la búsqueda desapasionada del conocimiento profundo del mundo natural, lo que Einstein llamó "los secretos del Viejo" (French, 1979, p. 275). La mejor investigación científica está motivada por una curiosidad insaciable por el modo en que opera el mundo. Y como la experimentación constriñe seriamente el conocimiento científico, los científicos están sujetos a lo que Richard Feynman llamó "un principio de pensamiento científico que corresponde a una especie de honestidad absoluta, de esfuerzo supremo de servicio" (1985, p. 341).

La verdad importa en la ciencia, al menos por razones prácticas. Los principios científicos subyacen a la ingeniería y a otras ocupaciones prácticas. Una física falsa traería por consecuencia puentes y edificios inseguros. La incorrecta teoría genética de Lysenko acarreó la desastrosa política agrícola soviética que ocasionó un hambre generalizada por el fracaso de los cultivos. A un nivel más profundo, la ciencia está íntimamente unida al sistema intelectual. Por ejemplo, los principios de la termodinámica son importantes para entender fenómenos tan dispares como la eficiencia de las máquinas de vapor y el equilibrio de las reacciones químicas. Las teorías científicas están muy limitadas tanto por hechos experimentales como por su relación con otras teorías. Por último, como de manera tan convincente argumentó Susan Haack, la búsqueda de la

verdad es la marca característica de toda actividad intelectualmente honrada (Haack, 1997).

La segunda parte del ideal moral se refiere a las relaciones entre los científicos: el principio de la economía del regalo. Puesto que la investigación científica es tan difícil y la ciencia es conocimiento público, la comunidad científica está sujeta a un ideal de comunicación totalmente abierta ejemplificado por la economía del regalo (Hyde, 1979).

La mejor manera de introducir el concepto de economía del regalo es contrastarlo con el de economía de los bienes de consumo, que rige nuestras relaciones económicas cotidianas. En la economía de los bienes de consumo las transacciones son intercambios cerrados, mutuamente benéficos: precio por productos, precio por servicios. Aparte quizá de una garantía bien clara, nada más se espera de la transacción. No se espera, y en muchos casos tampoco se desea, una relación posterior. Nadie espera que la compra de una prenda de vestir dé lugar a una amistad duradera con el vendedor. Cada quien realiza muchas de estas operaciones al día.

Por el contrario, los intercambios de regalos tienen el propósito de iniciar o mantener relaciones humanas. Damos regalos a quienes están más cerca de nosotros, y esos regalos a menudo son muy personales. Cuando damos un regalo no tenemos ninguna expectativa de que nos den nada a cambio, aunque quien lo recibe podría corresponder para mostrar que él también desea mantener la relación. No hay *quid pro quo*. Los regalos crean una comunidad de gratitud que inicia y fortalece vínculos sociales.

En este ideal, la comunidad científica es una economía del regalo. Los investigadores aportan sus regalos, los resultados de su investigación, para que otros los usen. A cambio, reciben los regalos con que otros contribuyen y los usan en su trabajo. Hay un ciclo continuo de regalar. Como en la economía del regalo, los científicos más respetados son los que más contribuyen. Los científicos que toman de la comunidad sin dar nada a cambio no son respetados, sobre todo si convierten los regalos de la comunidad en bienes de consumo vendibles para lucro personal. Para que la ciencia progrese es esencial que los nuevos hallazgos pasen a formar parte de la literatura abierta, donde se pueden probar, usar y desarrollar.

La economía del regalo es un ideal de la ciencia pura, la ciencia situada en el cuadrante de Bohr, pero en los cuadrantes de Pasteur y Edison hay tensión entre el ideal de la comunicación abierta y la aplicación del conocimiento científico a la producción de bienes de consumo útiles (Baird, 1997). Esta tensión se remonta a la época de Boyle y Hooke, y reviste una importancia particular en química, quizá la más útil de las ciencias. La comercialización exitosa de descubrimientos científicos a menudo requiere que la información se reserve de la literatura abierta, al menos mientras se tramita una patente, o que se mantenga en secreto como "propiedad industrial". Los científicos que ven aplicaciones comerciales en sus descubrimientos pueden caer en la tentación de guardarlos en secreto antes que aportarlos a la comunidad. Hay al menos dos peligros. Primero, un descubrimiento que no se divulga no queda sometido a escrutinio, por lo que cabe la posibilidad de que su autor intente comercializar algo incorrecto y malgaste tiempo y dinero. En segundo lugar, el descubrimiento no queda a disposición de otros

para que lo usen y lo desarrollen, lo que retrasa el progreso general de la ciencia.

Se puede encontrar una interesante discusión de la tensión entre la economía del regalo y la de los bienes de consumo en el reciente libro *Who Owns Academic Work*, de Corynne McSherry (2001). La autora rastrea la historia del concepto de autoría y la relación entre el acervo común de las ideas y la creación individual. La misma tensión existe en la ciencia, donde todo descubrimiento se basa en un patrimonio de investigaciones anteriores. En la sociedad contemporánea, el derecho de propiedad intelectual es un área de gran complicación para la ética, las políticas públicas y el derecho (Nelkin, 1984).

El concepto de la ciencia como economía del regalo forma parte importante del ideal moral de la ciencia, pero es incompleto, sobre todo para la ciencia que se hace en el cuadrante de Pasteur. Uno de los retos para una teoría de la ética en la ciencia es encontrar principios adicionales que rijan la ciencia aplicada. Tales principios necesariamente comprenderán la complicada relación entre la ciencia y la sociedad.

Comentarios finales

El estudio del profesionalismo y la ética en la ciencia se encuentra todavía en pañales. En este capítulo he intentado bosquejar una filosofía de la profesión de la ciencia y mostrar cómo esta perspectiva ofrece un conocimiento profundo de las interrogantes éticas. Aunque las diversas disciplinas científicas tienen mucho en común, cada una es única. Mi campo, el de la química, tiene una historia y tradiciones propias, distintas a las de la física o la biología. El estudio general del profesionalismo y la ética en la ciencia se enriquecerá examinando cada una de las disciplinas por separado para ver cómo se han desarrollado sus acuerdos internos y externos a través de la historia, y cómo funcionan en la práctica contemporánea. Dado que la ética es parte integral de la ciencia, tales estudios deberían revelar mucho sobre la historia y la filosofía de la ciencia.

Agradecimientos

Doy las gracias a la Camille and Henry Dreyfus Foundation por su apoyo a mi trabajo sobre ética científica. Las ideas de este artículo se han desarrollado a lo largo de muchos años en discusiones con Roger Jones, Brian P. Coppola, Michael Davis, Donald Gotterbarn y Susan Davis Kovac.

BIBLIOGRAFÍA

Baird, D., “Scientific Instrument Making, Epistemology and the Conflict between Gift and Commodity Economies”, *Techné: Electronic Journal of the Society for Philosophy and Technology* (http://scholar.lib.vt.edu/ejournals/STP/stp.html), vol. 2, núms. 3-4, 1997, pp. 25-46.

Barber, B., *Science and the Social Order*, Free Press, Nueva York, 1952.

Beauchamp, T. L., *Philosophical Ethics*, 2ª ed., McGraw-Hill, Nueva York, 1991.

———, y J. F. Childress, *Principles of Biomedical Ethics*, 5ª ed., Oxford University Press, Oxford, 2001.

Bok, S., *Common Values*, University of Missouri Press, Columbia, Missouri, 1995.

Broad, W., y N. Wade, *Betrayers of the Truth: Fraud and Deceit in the Halls of Science*, Simon & Schuster, Nueva York, 1982.

Brock, W. H., *The Norton History of Chemistry*, Norton, Nueva York, 1992.

Bronowski, J., *Science and Human Values* (ed. rev.), Harper Torchbooks, Nueva York, 1956.

Brown, Jr., G. E., “The Objectivity Crisis”, *American Journal of Physics*, vol. 60, núm. 9, 1992, pp. 779-781.

Bush, V., *Science: The Endless Frontier*, 1945, reimpr. de National Science Foundation, Washington, D. C., 1990.

Callahan, J. C. (ed.), *Ethical Issues in Professional Life*, Oxford University Press, Nueva York, 1988.

Committee on Professional Training, *Undergraduate Professional Education in Chemistry: Guidelines and Evaluation Procedures*, American Chemical Society, Washington, D. C., 1999.

Coppola, B. P., “Targeting Entry Points for Ethics in Chemistry Teaching and Learning”, *Journal of Chemical Education*, vol. 77, núm. 11, 2000, pp. 1506-1511.

Coppola, B. P., y D. H. Smith, “A Case for Ethics”, *Journal of Chemical Education*, vol. 73, núm. 1, 1996, pp. 33-34.

Cournand, A., y M. Meyer, “The Scientist’s Code”, *Minerva*, vol. 14, núm. 1, 1976, pp. 79-96.

Davis, M., “The Moral Authority of a Professional Code”, en J. R. Pennock y J. W. Chapman (eds.), *Authority Revisited, Nomos XXIX*, New York University Press, Nueva York y Londres, 1987.

Davis, M., *Thinking Like an Engineer*, Oxford University Press, Nueva York, 1998.

Dyson, F., “Science in Trouble”, *The American Scholar*, vol. 62, núm. 4, 1993, pp. 513-522.

Feynman, R. P., *Surely You’re Joking Mr. Feynman*, W. W. Norton, Nueva York, 1985.

French, A. P., *Einstein: A Centenary Volume*, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1979.

Gass, W., “The Case of the Obliging Stranger”, en W. Gass (ed.), *Fiction and the Fingers of Life*, Godine, Boston, 1980.

Gert, B., *Morality: A New Justification of the Moral Rules*, Oxford University Press, Nueva York, 1988.

Guston, D. H., *Between Politics and Science: Assuring the Integrity and Productivity of Research*, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.

———, y K. Keniston, “Introduction: The Social Contract for Science”, en D. H. Guston y K. Keniston (eds.), *The Fragile Contract: University Science and the Federal Government*, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1994.

Haack, S., “Science, Scientism, and Anti-Science in the Age of Preposterism”, *The Skeptical Inquirer* (http://www.csicop.org/si/9711/preposterism.html), vol. 21, núm. 6, 1997, pp. 37-42.

Hardwig, J., “Epistemic Dependence”, *Journal of Philosophy*, vol. 82, núm. 7, 1985, pp. 335-349.

———, “The Role of Trust in Knowledge”, *Journal of Philosophy*, vol. 88, núm. 12, 1991, pp. 693-708.

———, “Towards an Ethics of Expertise”, en D. E. Wueste (ed.), *Professional Ethics and Social Responsibility*, Rowman & Littlefield, Lanham, Maryland, 1994.

Harris, Jr., C. E., M. S. Pritchard y M. J. Rabins, *Engineering Ethics: Concepts and Cases*, Wadsworth, Belmont, California, 1995.

Holton, G., “On Doing One’s Damnedest: The Evolution of Trust in Scientific Findings”, en D. H. Guston y K. Keniston (eds.), *The Fragile Contract*, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1994.

Hyde, L., *The Gift: Imagination and the Erotic Life of Property*, Vintage, Nueva York, 1979.

Kitcher, P., *Science, Truth and Democracy*, Oxford University Press, Oxford, 2001.

Knight, D., *Ideas in Chemistry*, Rutgers, New Brunswick, Nueva Jersey, 1992.

———, y H. Kragh (eds.), *The Making of the Chemist*, Cambridge University Press, Cambridge, 1998.

Kovac, J., “Scientific Ethics in Chemical Education”, *Journal of Chemical Education*, vol. 73, núm. 10, 1996, pp. 926-928.

———, “The Ethical Chemist”, *CUR Quarterly*, vol. 18, núm. 3, 1998, pp. 109-113.

———, “Professional Ethics in the College and University Science Curriculum”, *Science and Education*, vol. 8, núm. 3, 1999, pp. 309-319.

———, “Science, Law, and the Ethics of Expertise”, *Tennessee Law Review*, vol. 67, núm. 2, 2000, pp. 397-408.

———, “Gifts and Commodities in Chemistry”, *Hyle*, vol. 7, núm. 2, 2001, pp. 141-153.

Kuhn, T. S., *The Structure of Scientific Revolutions*, University of Chicago Press, Chicago, 1962 [versión en español: *La estructura de las revoluciones científicas*, 3ª ed., FCE, México, 2006].

McSherry, C., *Who Owns Academic Work: Battling for Control of Intellectual Property*, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 2001.

Merton, R. K., “The Normative Structure of Science”, en R. K. Merton, *The Sociology of Science*, University of Chicago Press, Chicago, 1973, pp. 267-278.

Nelkin, D., *Science as Intellectual Property*, Macmillan, Nueva York, 1984.

Panel on Scientific Responsibility and the Conduct of Research, *Responsible Science*, vol. I, National Academy Press, Washington, D. C., 1992.

———, *Responsible Science*, vol. II, National Academy Press, Washington, D. C., 1993.

Polanyi, M., *Personal Knowledge*, Harper Torchbooks, Nueva York, 1964.

Popper, K., *The Logic of Scientific Discovery*, Harper & Row, Nueva York, 1965.

Proctor, R. N., *Value-Free Science*, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1991.

Rachels, J., *The Elements of Moral Philosophy*, 3ª ed., McGraw-Hill, Boston, 1999.

Reese, K. M. (ed.), *A Century of Chemistry*, American Chemical Society, Washington, D. C., 1976.

Resnik, D. B., *The Ethics of Science: An Introduction*, Routledge, Londres, 1998.

Shapin, S., “Who Was Robert Hooke?”, en M. Hunter y S. Schaffer (eds.), *Robert Hooke: New Studies*, Boydell Press, Woodbridge, Reino Unido, 1989.

Shapin, S., *A Social History of Truth*, University of Chicago Press, Chicago, 1994.

Steelman, J. R., *Science and Public Policy*, The President’s Scientific Research Board, U. S. Government Printing Office, Washington, D. C., 1947.

Stokes, D. E., *Pasteur’s Quadrant: Basic Science and Technological Innovation*, Brookings Institution Press,

Washington, D. C., 1997.

Ziman, J. M., *Public Knowledge*, Cambridge University Press, Cambridge, 1968.

Zuckerman, H., “Deviant Behavior and Social Control in Science”, en E. Sagarin (ed.), *Deviance and Social Change*, Sage Publications, Beverly Hills, California, 1977, pp. 87-138.

---

[*] Departamento de Química, Universidad de Tennessee, Knoxville, TN 37996-1600. Dirección electrónica: jkovac@utk.edu

CUARTA PARTE

LA QUÍMICA Y LA FÍSICA

IX. ¿HAY CAUSACIÓN DESCENDENTE EN QUÍMICA?

ROBIN FINDLAY HENDRY*

INTRODUCCIÓN

A menos que el futuro de la química depare una gran revisión ontológica, parece razonable suponer que dondequiera que hay un cambio químico, hay un cambio físico. Por ejemplo, sobre el supuesto de que la pertenencia de un objeto a una clase natural está determinada por su posesión de ciertas propiedades físicas, no puede haber cambio de adscripción a una clase química sin que lo haya también de tales propiedades físicas, que constituyen una clase. Hay unanimidad en la reciente filosofía de la mente en cuanto a que esta clase de relación —llamada superveniencia— es, sin embargo, compatible con un abanico de tesis sobre la relación ontológica entre dos ámbitos.[1] Por ejemplo, un postulado tanto del fisicalismo —la tesis según la cual las leyes y los hechos físicos determinan todas las leyes y todos los hechos— como de algunas formas de emergentismo es la tesis de que hay hechos *autónomos* asociados con los sistemas físicos de órdenes superiores de complejidad estudiados por algunas de las ciencias especiales.

Ahora bien, la química reviste aquí un interés múltiple. Para algunos, entre quienes me incluyo, es la ciencia principal de la materia, cuyos métodos, productos y relación con la física encierran interés en sí, aunque la relación entre ella y la física tiene repercusiones más amplias. Según la descripción de Oppenheim y Putnam (1958, p. 407), el reduccionismo clásico es *expresamente* jerárquico y acumulativo, y así debe serlo cualquier fisicalismo *no* reductivo, en la medida en que la relación de dependencia en torno a la cual gira también es transitiva. El recurso a las teorías de la química desempeña un importante papel en bioquímica, por lo que establecer la dependencia de lo químico respecto de lo físico facilitaría mucho establecer la dependencia física de lo biológico (y después, de lo mental). Sin embargo, eso no es todo, pues al evaluar las pruebas de la universalidad de las leyes de la física, las afirmaciones sobre la química deben ser esenciales (véase Hendry, 1999). Los no fisicalistas suelen sospechar que la universalidad de las leyes físicas es una ficción de los filósofos: una historia de conquista extrapolada de algunas escaramuzas imperialistas sin importancia. Como la química está justamente en la frontera del imperio de la física, es aquí donde el observador imparcial podría esperar algunas aplicaciones reales de la teoría física, que implicaran tratamientos detallados y rigurosos de problemas químicos en vez de bosquejos programáticos, promesas o aseveraciones de reducibilidad “en principio”.

En este trabajo investigaré hasta qué grado existen tales tratamientos, y si las aplicaciones de que *se dispone* pueden considerarse pruebas de la completitud de la física. Así, en las dos secciones siguientes examinaré el papel de la completitud como elemento de las diversas posturas fisicalistas, así como en los argumentos a favor de estas posturas. Procederé luego a evaluar algunas de las pruebas de la completitud en sí. Muy brevemente, mi argumento general con respecto a esta última es el siguiente: *i*) Ninguna tesis de compleción puede ser seria si no descarta la causación descendente. *ii*) Dadas ciertas estrategias argumentativas razonables con que cuenta el fisicalista, las pruebas de que dispone no sustentan las tesis de compleción que descartan la causación descendente. Ilustro la fase decisiva de mi argumento, la fase *ii*), con ejemplos de la

química cuántica.

El fisicalismo podría concebirse esquemáticamente como la afirmación de que los hechos físicos determinan todos los hechos. Para explicar semejante afirmación tenemos que hacer dos cosas: primero, decidir qué clases de hechos han de considerarse físicos, y luego, ofrecer alguna relación de dependencia que explique la idea de que un conjunto de hechos "determina" otro.[2]

¿Qué se considera físico? En la filosofía de la mente suele operar una interpretación amplia: a grandes rasgos, una según la cual lo "físico" comprende todo aquello que ocupa espacio (de ahí los enigmas especiales sobre la causación mental). La interpretación amplia puede ser inofensiva en ese contexto, pero obviamente resulta demasiado amplia para nuestro presente propósito, pues no excluye lo químico. Si las propiedades químicas son un subconjunto de las propiedades físicas, la dependencia se sigue automáticamente para cualquier postura fisicalista basada en una relación de dependencia reflexiva: sabemos enseguida que lo químico depende de lo físico, pero sólo porque depende de lo químico. Ésta sería una respuesta terminológica a la pregunta de la dependencia, y dejaría abierto qué relaciones de dependencia son válidas entre distintos subconjuntos de propiedades "físicas". Procedería una concepción más estricta e informativa de lo físico en relación con la *disciplina* de la física, pero esto no se ajustaría a las intuiciones fisicalistas en el sentido de que las propiedades físicas son básicas. La física misma estudia una heterogénea variedad de entidades y propiedades, y es difícil ver por qué las teorías construidas dentro de la dinámica de fluidos o la astrofísica, por ejemplo, habrían de ser más fundamentales que las teorías químicas.[3] Una postura fisicalista de este tipo tampoco resistiría una reflexión seria sobre cómo las contingencias históricas determinan qué campos fenoménicos terminaron por estudiarse en departamentos de física y no en (digamos) departamentos de ingeniería o de química.

Quizá proceda una concepción bien motivada de lo físico en relación con las leyes y las categorías asociadas con unas cuantas teorías "fundamentales" —léase generales y abstractas— de la física, especialmente la mecánica cuántica, la relatividad y sus descendientes. Esto parece admisible, ya que es presumiblemente la capacidad explicativa de estas grandes teorías lo que respalda el rango probatorio del fisicalismo. De hecho, es así como los fisicalistas han tendido a identificar lo físico: en un sentido que le permite contrastar con lo químico, y ser correspondientemente informativo (véanse, por ejemplo, Quine, 1981; Papineau, 1990; Field, 1992).

Vayamos, pues, a la segunda dimensión del fisicalismo: las posturas fisicalistas se han articulado en relación con una variedad de relaciones de dependencia, incluidas la superveniencia (no puede haber cambio alguno sin cambio físico), la realización (las propiedades de nivel superior son papeles causales desempeñados por propiedades físicas) y la identidad simbólica (todo lo concreto que ejemplifica una propiedad no física también ejemplifica una propiedad física), por nombrar sólo unas cuantas.[4] Se acostumbra distinguir entre posturas fisicalistas reductivas y no reductivas, dependiendo de si la relación de dependencia de que se trata implica o no que propiedades, hechos o

entidades de nivel superior no son "nada más que" propiedades, hechos o entidades de nivel inferior. Históricamente, la pregunta de si las ciencias ofrecen una imagen unificada del mundo se investigó primero con respecto a las relaciones lógicas entre sus teorías. ¿En qué sentido complementan las ciencias especiales el poder predictivo y expresivo de que goza, en principio, la física? Fue así como la pregunta de si un grupo de entidades o propiedades es reductible a otro se convirtió en la pregunta de qué clase de relaciones lógicas son pertinentes entre las *teorías* que las describen.[5] Si nos interesa la pregunta ontológica de cómo depende el objeto de estudio de la química (digamos) del de la física, las relaciones lógicas entre las teorías de la química y de la física, aunque no pierden importancia, pueden a lo sumo ofrecer pruebas para resolver la pregunta, antes que constituir una respuesta en sí mismas. Las preguntas lógicas y ontológicas se deshacen si es posible que el objeto de estudio de la química no sea "nada más que" el objeto de estudio de la química, mientras que, por razones prácticas (relativas a la complejidad y a la inabordabilidad matemática), nunca podrán deducirse teorías químicas de teorías físicas.

¿Cómo ha de entenderse la vaga frase "nada más que"? Kim (1997, pp. 279-286) ha articulado un fisicalismo funcionalista: el que un objeto tenga una propiedad de nivel superior (por ejemplo, mental o macroscópico) significa que tiene una propiedad física que desempeña un papel causal. Así, que un cuerpo sea transparente significa que tiene alguna propiedad física que lo hace transmitir la luz. La propiedad física que cumple la condición causal es el *realizador* del papel causal en ese cuerpo. Aunque una propiedad funcional puede realizarse de manera distinta en las diversas clases de cuerpo macroscópico, tiene sentido, argumenta Kim, identificar la transparencia del vidrio con la propiedad microestructural que la realiza: el ser transparente es, para el vidrio, "nada más que" el realizador microestructural que hay en él. Sin embargo, como admite Kim, esta última implicación se sigue sólo si se acepta que "la microestructura de un sistema determina sus propiedades causales-nómicas" (p. 283), porque el papel funcional se especifica causalmente; por tanto, el que el realizador realice la propiedad funcional que realiza (esto es, la relación misma entre realizador y papel) depende de cómo ocurren en efecto las cosas en cierta clase de sistema. Para que una microestructura determine la posesión de una propiedad funcional, debe determinar totalmente las propiedades causales-nómicas de ese sistema. Así, el argumento de Kim desde el realizacionismo al reduccionismo gira en torno a una tesis (para la cual, sin embargo, no ofrece apoyo independiente) que ha cobrado importancia capital para el fisicalismo: la completitud causal de lo físico. Cabe advertir también que, para que una postura fisicalista sea *reductiva*, debe sostener la completitud causal de lo físico (en adelante me referiré a posturas fisicalistas "estrictas" y "liberales"). Papineau (1990) formula así esta tesis: "[…] todos los acontecimientos físicos (o sus probabilidades de ocurrir) están enteramente determinados por acontecimientos físicos previos de acuerdo con leyes físicas" (Papineau, 1990, p. 67).

La versión de Papineau de la completitud de la física se refiere a la *ciencia* física, mientras que la versión de Kim tiene que ver con las relaciones causales que constituyen

su objeto de estudio. La relación viene a través de la aseveración de Papineau de que la ciencia física aspira a la completitud en el sentido de que los procesos causales que describe —o, en el límite ideal de la investigación física, *describiría*— están cerrados con respecto a lo no físico: no hay factores causales que no sean descritos por la física, o para cuya descripción la física se someta a otra ciencia. A este respecto, argumenta, la física difiere mucho de, por ejemplo, la meteorología, la química, la biología y la psicología, todas las cuales admiten factores causales externos.

La tesis de la completitud parece ser esencial para el fisicalismo contemporáneo, y constituye la prueba de fuego de compromiso con la aceptación absoluta de la postura. Así, McLaughlin (1992), Horgan (1993) y Kim (1997) se oponen a las versiones del fisicalismo basadas en la superveniencia como relación de dependencia, porque éstas no descartan la causación descendente, contra lo que debe hacer cualquier fisicalismo digno de llamarse así. Una manera de plantear el problema es ésta: supongamos que un grupo, A, de propiedades de una ciencia especial sobreviene a un grupo de propiedades físicas. Si existen relaciones semejantes a leyes entre las propiedades A (leyes de la ciencia especial), éstas se reflejarán en relaciones entre las propiedades físicas, aunque estas últimas relaciones muy bien pueden ser confusas y disyuntivas. Dada la superveniencia, cualesquiera cambios A irán acompañados de cambios físicos: ¿deberíamos considerar los cambios A como determinantes de los cambios físicos, o a la inversa? Si lo primero, entonces hay un sentido en el que las propiedades A "se imponen a la fuerza" sobre las propiedades físicas (por lo que hay "causación descendente" de las propiedades A a las propiedades físicas a las cuales sobrevienen). Sólo la completitud causal de lo físico descarta esta posibilidad. Una última razón de la importancia de la compleción para el fisicalismo es que, en la medida en que aparece (reconocida o no)[6] como elemento en argumentos a favor del fisicalismo, en sí misma parece ser una tesis empírica. La clausura de lo físico no sólo explica el papel privilegiado que la física desempeña en la ontología, sino que es la clase de principio en cuyo apoyo podemos recurrir directamente a descubrimientos y explicaciones dentro de la propia ciencia.

No hace mucho Brian McLaughlin (1992) relató la historia de lo que llama el "emergentismo británico", una corriente de pensamiento materialista no reductivo que él retrotrae hasta John Stuart Mill y de él a C. D. Broad, en quien me centraré aquí. A grandes rasgos, los emergentistas británicos sostenían que las cosas que hay en el mundo están compuestas sólo de sustancia material, pero que los agregados complejos de sustancia material pueden presentar clases nuevas, emergentes, de comportamiento. Muy vago hasta aquí: ¿qué se quiere decir con "nuevo"? Broad y los demás emergentistas discurrieron varias formulaciones, pero quizá la más clara de todas sea la siguiente: supongamos que el comportamiento emergente es semejante a una ley, como presumiblemente debe serlo si una ciencia especial se dedica a estudiarlo. Una ley que algún sistema complejo presenta es emergente si la ocurrencia del comportamiento que describe no está determinada por las leyes que rigen las partes del sistema en aislamiento. Si los agregados de sustancia material y sus pautas de comportamiento semejantes a leyes se estratifican en "órdenes" de complejidad, una ley emergente es una cuestión de hecho primitiva referente al comportamiento de los agregados en su nivel de aplicación. La presentación que Broad hace de estas posibilidades a veces parece proceder en términos lógicos o epistémicos: una ley emergente no podía deducirse o predecirse a partir de las leyes fundamentales que rigen los constituyentes del sistema al que se refería (sobre una discusión al respecto, véase Stephan, 1992). Una formulación epistémica de un comportamiento emergente de esta clase sería insatisfactoria porque *i*) relativizaría la emergencia en función del estado del conocimiento desde el cual se hace la predicción, y *ii*), aunque la no predecibilidad podría ser prueba de emergencia, no constituye en sí emergencia, puesto que hay clases de comportamiento impredecibles pero no emergentes.

Por vía de explicación del emergentismo, Broad (1925, pp. 44 y ss.) articuló una postura a la que llamó "mecanicismo puro", una variedad de lo que hoy se llamaría microdeterminismo. Este "ideal de punto de vista mecánico del reino material" (p. 44) supondría que hay una sustancia física fundamental de la que todo está hecho, y una cualidad intrínseca fundamental (p. ej., la masa o la carga). Una ley fundamental (p. ej., la ley de la gravitación o la ley de Coulomb) determinaría interacciones entre pares de partículas, dada su posesión de propiedades intrínsecas pertinentes, como tener una masa específica. Supongamos, además, que existe alguna ley de la combinación que determina una fuerza resultante, dada la acción de cierto número de fuerzas componentes. El mecanicismo puro sostiene que los movimientos dentro de cualquier sistema constituido por un agregado de partículas deben surgir de las interacciones entre sus partes, como lo determinan las leyes de la interacción y la combinación.

Broad advierte que el mecanicismo *debe* fracasar debido a la existencia de cualidades irreductiblemente macroscópicas como colores y temperaturas: "El hecho escueto es que el mundo externo, tal como lo percibimos, no parece tener la homogeneidad que el mecanicismo puro exige. Si *realmente* tiene las varias cualidades sensibles

irreductiblemente distintas que *parece* tener, el mecanicismo puro no puede ser cierto respecto de la totalidad del mundo externo y no puede ser toda la verdad sobre ninguna parte de él" (1925, pp. 50-51).

El fracaso del mecanicismo puro en razón de la existencia de cualidades irreductiblemente macroscópicas no atañe de manera directa a la completitud de la física. Es posible, después de todo, que las leyes mecanicistas que rigen las interacciones de las partículas microscópicas sean causalmente completas, y que en consecuencia las cualidades macroscópicas sean causalmente inertes con respecto al comportamiento de los sistemas de partículas microscópicas. Broad parece haber estado consciente de esta posibilidad, porque suponiendo que los objetos sensibles realmente tengan las "cualidades sensibles irreductiblemente distintas" que parecen tener,[7] "lo más que podemos hacer por el mecanicismo puro […] es dividir el mundo externo, a escala primero macroscópica y luego microscópica; suponer que las cualidades macroscópicas que permean cualquier región están determinadas causalmente por los sucesos y objetos que existen dentro de ella, y esperar que estos últimos, en sus interacciones *entre sí* en todo caso, cumplan las condiciones del mecanicismo puro" (1925, p. 51).

Broad procede a señalar que "no hay ninguna razón *a priori* por la que los sucesos y objetos microscópicos deban responder a las exigencias del mecanicismo puro, ni siquiera en sus interacciones entre sí; que, en la medida en que la ciencia nos lo puede decir por ahora, no es así; y que, en todo caso, las leyes que los vinculan con la existencia de cualidades macroscópicas *no pueden* ser mecánicas en el sentido definido" (1925, p. 51).

A esto sigue una distinción entre leyes "intrafísicas" y "transfísicas" (1925, p. 52); las leyes intrafísicas explican cualidades que los cuerpos físicos microscópicos pueden tener, mientras que las leyes transfísicas asocian cualidades físicas con (por ejemplo) cualidades irreductiblemente macroscópicas. Así, por ejemplo, una ley según la cual todos los cuerpos de cierta composición física tienen determinado color sería transfísica en este sentido. Las leyes intrafísicas, pensaba Broad, quizá pudieran ser (aunque aventuró la opinión de que en realidad no lo son) como las concibe el mecanicismo puro, mientras que las leyes transfísicas necesariamente no podrían serlo.

Broad estableció una distinción doble entre las teorías ontológicas según la manera en que buscaban explicar las "diferencias de comportamiento entre distintas cosas" (1925, p. 58). Por un lado hay una clase de teoría que recurre a la presencia de determinado componente o sustancia como explicación de un tipo específico de comportamiento (p. ej., vital o teleológico). Por el otro está la clase de teoría que recurre sólo a la diferencia de *estructura*, pero esta segunda clase de teoría también puede tener dos formas:

i) En la primera forma de la teoría, el comportamiento característico del todo no *podría*, ni siquiera en teoría, deducirse del conocimiento más completo del comportamiento de sus componentes tomados por separado o en otras combinaciones, ni del de sus proporciones y disposiciones en ese todo…

ii) En la segunda forma de la teoría, el comportamiento característico del todo no sólo está completamente *determinado por* la naturaleza y las disposiciones de sus

> componentes; además de esto se sostiene que el comportamiento del todo podría, al menos en teoría, deducirse de un conocimiento suficiente de la manera en que los componentes se comportan en aislamiento o en otros todos de clase más simple [1925, p. 59].

Broad llamó "teoría de la emergencia" a la primera forma de esta segunda clase de teoría, y "mecanicista" a la segunda. La cita deja en claro que la posibilidad de deducir el comportamiento del todo del comportamiento de sus componentes es un *signo* de la determinación nomológica de la teoría mecanicista. De manera similar, la *no* deducibilidad del comportamiento del todo postulada por el emergentista no es peculiar de ningún estado determinado del conocimiento, porque el comportamiento emergente no puede "deducirse del *conocimiento más completo* del comportamiento de sus componentes" (1925, p. 71).

Ya se ha señalado que la emergencia se produce en diferentes grados modales, desde la emergencia necesaria de las leyes transfísicas (dadas las clases de cualidades que explican) hasta la emergencia meramente contingente (dadas las clases de cualidades que explican) de las leyes intrafísicas emergentes, si las hay. Por ejemplo, Broad presenta la respiración como un proceso que se puede describir físicamente (de ahí que sea intrafísico), pero que bien puede cumplir su criterio de emergencia:

> El proceso de la respiración es una clase determinada de movimiento que ocurre en los cuerpos vivos. Y se puede describir sin ninguna referencia esencial a cualidades secundarias. Sin embargo, en sus detalles puede ser tal que no sea deducible de cantidad alguna de conocimiento relativo a todos no vivos y los movimientos que tienen lugar en ellos. En tal caso, es una "característica última" del orden vital […] No obstante, esta ley no es transfísica en el sentido definido [1925, pp. 80-81].

Las leyes transfísicas son "necesariamente del tipo emergente" (p. 80), porque vinculan propiedades físicas con (por ejemplo) cualidades secundarias. En cambio, la respiración es un movimiento, "por lo que no se puede demostrar positivamente que la respiración sea una 'característica última' ni que su causación sea emergente y no mecanicista" (1925, p. 81).

Una explicación mecanicista de la respiración mostraría que se trata de una clase de comportamiento cuya ocurrencia está determinada por leyes físicas más profundas. La falta de tal explicación puede ser consecuencia, *o bien i*) de la naturaleza incompleta de nuestro conocimiento (ya de las leyes fundamentales mismas, ya de sus consecuencias), *o bien ii*) del hecho de que la respiración no es una clase de comportamiento cuya ocurrencia esté determinada por leyes físicas más profundas. Hay, pues, también una diferencia epistémica entre las leyes transfísicas y las leyes intrafísicas emergentes: se puede saber que las primeras son emergentes *a priori* reflexionando en las clases de cualidades explicadas. De las segundas, en cambio, no se puede saber, y tampoco "se puede demostrar positivamente que cualquier ley intrafísica sea emergente" (1925, p. 80), porque: "En el reino físico siempre queda la posibilidad lógica de que la apariencia de las leyes emergentes se deba a nuestro imperfecto conocimiento de la estructura

microscópica o a nuestra incompetencia matemática” (1925, p. 81).

El emergentista y el mecanicista difieren en cuanto al grado hasta el cual la unidad nomológica subyace a las diferencias manifiestas en el comportamiento de las cosas: “En la teoría emergentista tenemos que hacernos a la idea de que hay mucha menos unidad en el mundo externo y una relación mucho menos íntima entre las diversas ciencias” (1925, p. 77).

La diferencia es cuestión de grado. En un extremo del espectro, el mecanicismo puro admitía una sola ley fundamental de interacción (p. ej., la de la gravitación). Se producirían formas más laxas de mecanicismo donde se reconoce que algunas clases de interacción independientes (p. ej., electromagnéticas) complican el cuadro. De ahí que la tesis mecanicista deba formularse en relación con un conjunto de interacciones adoptado como hipótesis, y no con un estado del conocimiento. En el otro extremo del espectro, el emergentista postula además un abanico de leyes irreductibles referentes al comportamiento de clases específicas de sistemas de agregados, las cuales pueden ser del tipo transfísico o intrafísico. Dejando a un lado las leyes emergentes transfísicas, el emergentista admite que el comportamiento *físico* de los sistemas físicos de agregados quizá no esté del todo determinado por las leyes dinámicas generales que rigen sus partes en aislamiento. Dicho de otro modo, mientras que el mecanicista postula una sola ley fundamental, o sólo algunas de tales leyes, el emergentista admite que puede haber muchísimas.[8] Volviendo al caso concreto de la química, el mecanicista sostiene que bastan unas cuantas leyes de la dinámica microscópica para determinar el comportamiento de todo átomo o molécula (Broad, 1925, p. 70). Por tanto, dadas esas pocas leyes y la constitución física de una especie química, es posible en principio (aunque quizá no en la práctica) deducir una explicación completa de su comportamiento. El emergentista admite que para algunos átomos y moléculas hay leyes fundamentales que describen sólo su comportamiento y que no son casos particulares de leyes más generales.

Las distintas versiones que da Broad del mecanicismo se exponen con más elegancia en el marco de la formulación hamiltoniana de la mecánica, que condensa la ley de la combinación de fuerzas en una expresión que designa la energía de un sistema compuesto. Una lista completa de las fuerzas “fundamentales” que operan en un sistema basta para determinar una función hamiltoniana “resultante” para ese sistema, la cual representa su energía. El oponente mecanicista de Broad sostiene que sólo los hamiltonianos que son “resultantes” con respecto a esta lista de fuerzas rigen los movimientos físicos reales. Cabe advertir que el emergentista y el mecanicista no discrepan en cuanto a si todo sistema tiene un hamiltoniano, sino sólo en si todo hamiltoniano de un sistema está determinado por la especificación de unas cuantas interacciones que ocurren de manera muy general. Todo movimiento puede concebirse como surgido de uno u otro hamiltoniano, pero si el comportamiento de algunos sistemas está regido por hamiltonianos “no resultantes”,[9] entonces hay un sentido preciso en el que el comportamiento de esos sistemas compuestos no está determinado por las leyes más generales que rigen sus constituyentes. Además, en la medida en que el

comportamiento de cualquier subsistema es afectado por los supersistemas en los cuales participa, el comportamiento emergente de los sistemas complejos debe verse como determinante del comportamiento de sus partes constitutivas, mas no enteramente determinado *por* él. Y ésta es la causación descendente.

McLaughlin (1992, p. 89) concede que el emergentismo es una postura perfectamente coherente, lo mismo que la posibilidad de la causación descendente. La salvedad es que el emergentismo está fácticamente equivocado, porque los sistemas químicos o biológicos no aportan pruebas de la causación descendente ni de fuerzas o hamiltonianos "configurativos". De haber habido algo semejante a fuerzas configurativas que rigieran el enlace químico, cabía esperar que se las hubiera citado cuando la química cuántica llegó a explicar el enlace químico en los años que siguieron a 1925 (véase también Papineau, 2000, pp. 197-202). El mismo McLaughlin no investiga los detalles empíricos, sino que hace una pregunta histórica: ¿por qué fue *The Mind and its Place in Nature* (1925), de Broad, el último gran opúsculo emergentista? Su respuesta es que el advenimiento de la mecánica cuántica dio lugar a una nueva era de explicación científica, en la que todas las leyes supuestamente *sui generis* del enlace químico se ajustaron al marco de la mecánica cuántica. La opinión de Kim (1997, p. 290) difiere un poco. Algunos de los mismos ejemplos que Broad propone como casos de emergencia, como la transparencia del agua, fueron especialmente desafortunados: cuando caemos en la cuenta de que la transparencia no es más que una propiedad funcional —esto es, la propiedad de ciertas propiedades físicas de establecer determinadas relaciones causales con la luz—, entonces la detallada explicación mecánico cuántica de tales interacciones nos convence de que la transparencia del agua no tiene nada de misteriosamente "no físico".[10]

Sin embargo, en la medida en que éstos son argumentos empíricos en favor de versiones estrictas del fisicalismo, deben constituir *ipso facto* argumentos en contra de la causación descendente. Ahora bien, la postura de Broad es perfectamente compatible con la existencia de explicaciones afortunadas en las teorías físicas del enlace químico. En lo que el emergentista de Broad discrepa del fisicalista estricto (o del mecanicista puro) es en la naturaleza de esas explicaciones físicas: ¿son las fuerzas o los hamiltonianos que citan resultantes o configurativos? Si resultantes, entonces el argumento en favor del fisicalismo estricto es fuerte. Si configurativos, entonces a primera vista tenemos ejemplos de causación descendente y pruebas *en contra* del fisicalismo estricto. Como los principales ejemplos empíricos citados por los fisicalistas estrictos implican el enlace químico, su postura no tendría buenas perspectivas en comparación con las varias posturas fisicalistas más laxas que admiten la posibilidad de la causación descendente. En torno a esta pregunta genuinamente empírica debe girar la fuerza del argumento en pro del fisicalismo estricto, y a ella dirijo ahora la atención.

Desde hace mucho Nancy Cartwright viene argumentando en favor de tres tesis acerca de la aplicación de teorías físicas generales. En primer lugar, la aplicabilidad de una teoría física abstracta como la mecánica cuántica a un sistema concreto requiere un modelo del tipo de sistema en cuestión. En segundo lugar, no toda clase de sistema físico está representada por tal modelo. En tercer lugar, los modelos que representan algunas clases complejas de sistema, como los láseres o las moléculas de benceno, pueden ser relativamente autónomos en el sentido de que no se asocian de manera sistemática con modelos más generalmente aplicables o fundamentales.[11] En otro trabajo expuse un argumento en pro de esta tercera tesis con respecto a los modelos moleculares mecánico cuánticos (véase Hendry, 1998). En esta sección quisiera exponer un argumento algo distinto, asociando estas tesis directamente con el fisicalismo, la emergencia y la causación descendente. El resultado de nuestro estudio de la postura emergentista de Broad fue que aunque hubiera, en principio (o en la mente de Dios), un tratamiento mecánico cuántico preciso de todo sistema material, esto no bastaría para establecer la tesis de compleción requerida por el fisicalismo estricto. El emergentista también espera un hamiltoniano para cada sistema, pero sostiene que algunos de ellos han de ser “configurativos”. Si el emergentista está en lo correcto, entonces, aunque la mecánica cuántica se haya aplicado con éxito al hidrógeno atómico y a otros sistemas simples, los movimientos de los electrones en sistemas más complejos se describirán de manera adecuada sólo por hamiltonianos configurativos. De hecho, la situación es un tanto peor en la mecánica cuántica molecular: al parecer sí hay una manera de generar un hamiltoniano genuinamente resultante para cada molécula, pero por buenas razones éstos se ignoran en la explicación, en favor de lo que parecen ser hamiltonianos configurativos. Mi precisión principal aquí es que los hamiltonianos resultantes se ignoran no sólo por las razones pragmáticas de su inabordabilidad matemática, sino por la razón epistémica de que son del todo inadecuados para describir moléculas.

Se requieren ante todo algunas condiciones previas, incluida la adecuada formulación de una tesis de compleción para una teoría como la mecánica cuántica. Supongamos que comenzamos así:

1) Para cada sistema físico hay un hamiltoniano descriptivamente adecuado.

Supongamos que un hamiltoniano es descriptivamente adecuado para un sistema si posee un rango de autofunciones cuyos autovalores corresponden a los estados de energía de ese sistema. Ahora bien, *1* no es satisfactorio: la existencia para cada sistema de *cualquier* hamiltoniano antiguo, por descriptivamente exacto que sea, no basta para una tesis de compleción que sirva al fisicalismo estricto, por dos razones. En primer lugar, si no se imponen restricciones a la aceptabilidad de los hamiltonianos además de las restricciones matemáticas habituales, el requerimiento es presumiblemente ocioso. Las solas matemáticas nos convencerían de que *1* es cierto: dado cualquier espectro de estados de energía, basta trabajar hacia atrás para construir un operador hermítico con un conjunto de funciones propias con el espectro requerido como valores propios; poner en

ecuación este operador con la suma de los operadores de la energía cinética y la energía potencial (el operador de la energía cinética se determina para cada sistema; el operador potencial no es más que el "hamiltoniano" *ad hoc* menos el operador de la energía cinética). Presumiblemente, esto no es lo que se quiere decir cuando el fisicalista requiere que sólo acontecimientos físicos determinen (las posibilidades de) acontecimientos físicos *de acuerdo con* leyes físicas. La lección del emergentismo de Broad es que la sola existencia de una función de fuerza para cada sistema, que no cumple con más restricciones en su construcción, es incapaz de descartar la causación descendente, porque la función de fuerza para algunos sistemas complejos podría ser "configurativa". Lo mismo se aplica a los hamiltonianos y la mecánica cuántica. En suma, un argumento en favor del fisicalismo estricto requiere un argumento en pro de la compleción de la física, el cual constituye también una refutación del emergentismo.[12] Así pues, el fisicalismo estricto, del tipo incompatible con la causación descendente, requiere algo como lo siguiente:

2) Para cada sistema físico hay un hamiltoniano "resultante" descriptivamente adecuado.

Lo que se necesita ahora es una formulación clara de la distinción entre hamiltonianos "resultantes" y "configurativos", lo que es fácil, al menos para la mecánica cuántica molecular. El hamiltoniano resultante para cualquier sistema específico es aquel que se obtiene con el siguiente método:[13]

i) Especificar una lista de interacciones físicas fundamentales (gravitacionales, electromagnéticas, nucleares fuerte y débil).
ii) Enumerar las micropartículas presentes en el sistema pertinente y listar sus cargas, masas y valores de cualesquiera otras cantidades pertinentes.
iii) Usando sólo las fuerzas "fundamentales" aprobadas en *i*, listar las interacciones que ocurren entre las micropartículas enumeradas en *ii*.
iv) Usando los resultados de los pasos *i*-*iii*, anotar los operadores de la energía cinética y potencial, y sumarlos.

Felizmente para el fisicalista estricto, algo muy parecido a este método se enseña a todo estudiante de química cuántica, con la condición de que la enumeración de las partículas se quede al nivel de electrones y núcleos, y de que en general sólo se incluyan términos electrostáticos en el operador de la energía potencial. El método en verdad produce un hamiltoniano para cada molécula, con la pequeña dificultad de que da el mismo hamiltoniano para los isómeros, que suelen ser muy distintos desde el punto de vista químico. Parecería, pues, que se reivindican las intuiciones universalistas del fisicalista, al menos en el ámbito de la mecánica cuántica molecular. No obstante, por desgracia para el fisicalista estricto, estos hamiltonianos desempeñan un papel muy limitado en las explicaciones químico-cuánticas (con excepción, como era previsible, de los sistemas muy simples). En cambio, las explicaciones químico-cuánticas utilizan hamiltonianos modelo que no son obtenibles con el algoritmo descrito. Desde luego, el

fisicalista estricto alegará que todo lo que se explica por referencia a los hamiltonianos modelo podría (en principio) explicarse con los hamiltonianos "resultantes", porque los primeros se aproximan a los segundos. Consideraré brevemente esta afirmación: para empezar examinemos los casos.

Históricamente, el desarrollo de la teoría cuántica estuvo estrechamente asociado con la espectroscopía, en esencia porque la mecánica clásica fracasó muchas veces en el intento de ofrecer explicaciones adecuadas del comportamiento espectroscópico de las moléculas. Sin embargo, si se ignoran los pasos *i-iv*, ¿cómo comienza en realidad una descripción mecanocuántica de los espectros de una molécula simple? Un libro de texto de espectroscopia describe así el bióxido de carbono:

> La molécula de CO_2 es lineal y contiene tres átomos; tiene por tanto cuatro vibraciones fundamentales [...] La vibración de tensión simétrica es inactiva en el infrarrojo porque no produce ningún cambio en el momento bipolar de la molécula. Las vibraciones de flexión [...] son equivalentes, y son los componentes resueltos de un movimiento de flexión orientado en cualquier ángulo con el eje internuclear; tienen la misma frecuencia y se dice que son doblemente degeneradas [Silverstein, Bassler y Morrill, 1981, p. 96].

El siguiente paso es aplicar la mecánica cuántica. Hay modelos mecánico cuánticos de cuerpos rotatorios simples y oscilatorios simples, que en los libros de texto de mecánica cuántica suelen encontrarse en el capítulo *siguiente* a aquel en que se introdujo la ecuación de Schrödinger. Con algunos ajustes, podemos ver partes de la molécula como osciladores armónicos y rotores rígidos mecánico cuánticos, los cuales nos permiten cuantizar los movimientos rotatorios y vibratorios que, como ya nos dice la teoría fundamental de la química, debe presentar la molécula de bióxido de carbono. Esto da los niveles de energía: las diferencias entre ellos corresponden a líneas espectrales (en la región infrarroja en el caso de los modos vibratorios del CO_2). Para obtener una descripción más precisa, considérense los modos vibratorios y rotatorios *acoplados*. En una primera aproximación, los modos vibratorios y rotatorios se toman como *aditivos*, pero se puede explicar una estructura más fina en relación con la no-armonicidad y otros efectos de la distorsión de la molécula con respecto a su geometría de equilibrio (véase, por ejemplo, Steinfeld, 1985, cap. 8).

Revisemos la estructura de la explicación que antecede: usamos la mecánica cuántica para explicar los movimientos de partes de la molécula *en el contexto* de una estructura dada de la molécula en su totalidad. El emergentista considera lo anterior un caso de causación descendente: no recuperamos la estructura del CO_2 del hamiltoniano "resultante", dadas las cargas y masas de los varios electrones y núcleos, sino que vimos los movimientos de esos electrones y núcleos como restringidos por la molécula de la que forman parte. Desde luego, el fisicalista dirá que los pasos *i-iv* se ignoran sólo por las razones prácticas de su inabordabilidad. En principio, se podría dar la misma explicación con un abordaje idéntico. Una manera de respaldar tal aseveración sería tener una justificación *teórica* de los atributos de la estructura molecular, que nos permite vincular el hamiltoniano "modelo" con el "exacto": lo que explicamos en realidad con el primero, podríamos haberlo explicado con el segundo. En otro trabajo (1998, sección 2) llamé a lo

anterior "defensa supletoria" de los hamiltonianos modelo, porque éstos hacen las veces de los exactos.

La aproximación de Born-Oppenheimer, como se suele presentar en los libros de texto de química teórica, cumple exactamente la misma función. Suele dársele una justificación heurística como en la siguiente explicación de cómo se aplica al ión de la molécula de hidrógeno H_2^+, que consta de dos núcleos de hidrógeno y un electrón:

> La aproximación de Born-Oppenheimer supone que los núcleos, al ser tan masivos, se mueven mucho más lentamente que los electrones, y pueden considerarse estacionarios. Siendo éste el caso, podemos decidir que los núcleos tengan una separación definida (esto es, podemos elegir cierta *longitud de enlace*) y resolver la ecuación de Schrödinger para los electrones únicamente; luego podemos elegir una longitud de enlace distinta y repetir el cálculo. Así es posible calcular cómo varía la energía de la molécula según la longitud del enlace (y en moléculas más complejas también según los ángulos), e identificar la geometría de equilibrio de la molécula con el punto más bajo de esta curva. Esto es mucho más fácil que tratar de resolver toda la ecuación de Schrödinger abordando las tres partículas sobre una sola base [Atkins, 1986, p. 375].

No obstante, es difícil ver cómo esto nos lleva otra vez al hamiltoniano resultante de los pasos *i-iv*. La función de onda de Born-Oppenheimer parece más la solución a una ecuación totalmente distinta: los núcleos se tratan de manera clásica, y concebimos los electrones como restringidos por el campo resultante.

Si la cuestión es el tratamiento no-mecánico cuántico de los núcleos, necesitamos una prueba matemática de que esto no influye mucho en la energía, que quizá pueda obtenerse de lo que a veces se llama aproximación adiabática, a la cual la aproximación de Born-Oppenheimer puede considerarse una aproximación adicional. Supongamos que podemos disociar los movimientos nucleares y electrónicos. Los cálculos de Born-Oppenheimer en todas las configuraciones nucleares darían por resultado una serie de campos electrónicos, los cuales pueden usarse como restricción en un subsiguiente tratamiento mecánico cuántico de los movimientos nucleares. Sin embargo, ¿podría decirse con razón que el producto de este cálculo describe una molécula? En el cálculo que antecede, la calidad de la aproximación (esto es, su cercanía al tratamiento "exacto") se advierte por medio del valor que da de la energía total de la molécula. No obstante, al optimizar la energía, prescindimos de las propiedades de simetría de la molécula de las cuales dependen las explicaciones de su comportamiento químico y espectroscópico. El hamiltoniano molecular "resultante" de los pasos *i-iv* goza de permutación nuclear y simetrías rotatorias, no así las estructuras de Born-Oppenheimer —ni las moléculas reales— (véanse discusiones al respecto en Woolley, 1976, p. 34, y Hendry, 1998, sección 3). No sólo eso: la simetría menor del cloruro de hidrógeno, por ejemplo, es esencial para la explicación de su comportamiento ácido y su punto de ebullición (véase, también, Woolley y Sutcliffe, 1977). Quizá, pues, los hamiltonianos "exactos" que se obtienen con los pasos *i-iv* no pueden hacer las minuciosas distinciones entre moléculas que la explicación química requiere, y ésta es la razón de que no aparezcan en ellas. Así, Woolley argumenta que el "hamiltoniano molecular completo, sin espín [...], describe las

interacciones de un conjunto de electrones y núcleos; no describe una especie molecular determinada” (1991, p. 26).

El problema surge de la *naturaleza* de los hamiltonianos “resultantes”, no de su abordabilidad matemática. Poniendo como ejemplo la fórmula molecular C_3H_4, Woolley argumenta que

> esto presenta un conjunto de tres núcleos de carbono, cuatro protones y 22 electrones. Para la química cuántica imaginamos fácilmente que los núcleos están colocados en las disposiciones que corresponden a las tres distintas moléculas estables de esta fórmula, y entonces aplicamos la mecánica cuántica (la ecuación de Schrödinger) a los electrones para obtener la energía electrónica total en los tres casos. Otras disposiciones nucleares llevan a distintas energías electrónicas, y representamos el conjunto completo de tales energías como una superficie de energía potencial (incluida por supuesto la energía clásica de Coulomb de los núcleos). Suponiendo que aplicamos la mecánica cuántica a *todas* las partículas de una vez, ¿qué obtenemos? Es más fácil decir lo que nunca hemos encontrado hasta ahora: ningún indicio de tres isómeros distintos de las moléculas de aleno, ciclopropeno y metilacetileno [1998, p. 11].

Para obtener la descripción mecánico cuántica de las “especies moleculares determinadas”, aleno, ciclopropeno y metilacetileno, es necesario introducir manualmente la configuración molecular. Ésta es precisamente, según Woolley, la función que desempeña el procedimiento de Born-Oppenheimer, que en su opinión no es en realidad una aproximación. La queja no es que *no* haya explicaciones de formas moleculares determinadas empíricamente, ni siquiera que las explicaciones sean *ad hoc* o insatisfactorias, sino que la explicación está condicionada a posiciones nucleares determinadas: *si* los movimientos electrónicos están restringidos por un eje nuclear estable, *entonces* la dependencia de energía es tal que determina cierta configuración energética mínima.

Desde luego, nada de esto descarta una “defensa supletoria” diferente, que gire en torno a una relación matemática distinta entre los hamiltonianos modelo y el hamiltoniano “resultante” exacto. Tampoco descarta una manera diversa de generar un hamiltoniano “resultante” respetable desde el punto de vista fisicalista para cada molécula, y que fuera de utilidad explicativa. Esto es cierto, pero la responsabilidad de la prueba ha vuelto al lado del fisicalista estricto.

Este cuadro de falta de unidad puede ser, por supuesto, temporal. Quizá la física esté trabajando hacia una representación más completa y unificada de la realidad molecular. ¿Qué pruebas hay de esto? De acuerdo con un argumento, el requerimiento de inclusión universal está integrado en la práctica misma de la física. Así, Quine opina que si el físico sospechara que algún suceso no consiste en una redistribución de los estados elementales prevista por su teoría física, buscaría la manera de complementar la teoría. La inclusión completa en este sentido es tarea propia de la física y de ninguna otra ciencia (1981, p. 98).

Lo anterior ubica a la superveniencia fuera del método científico. El físico no se conformaría con menos. ¿Cómo hace un físico para mostrar que algún suceso *sí* consiste en una redistribución de los estados elementales considerada por su teoría de la física? Dando una aplicación apropiada de la teoría en cuestión, que *implique* que el suceso ocurrió. La afirmación es entonces que los físicos tienen el deber de ofrecer aplicaciones de sus teorías a toda clase de situación física, lo que parece casi tan falso como las aseveraciones filosóficas sobre la práctica científica. ¿Qué esfuerzo serio ha dedicado jamás *algún* físico a comprobar si los movimientos observados del Puente del Forth, por ejemplo, consisten en redistribuciones de estados elementales previstos por la actual teoría de la física? No se trata sólo de la tesis de Lakatos de que hay "casos refractarios" a toda teoría, de que la investigación científica tiende a realizarse en un "océano de anomalías" (Lakatos, 1970, p. 138). Tampoco se trata de la tesis pesimista inductiva de que cabe esperar la refutación, tarde o temprano, de *cualquier* teoría particular. Si son ciertas, ambas afirmaciones se aplican también a ciencias distintas de la física dentro de *sus* respectivos campos, y podrían aplicarse a la física aunque las teorías físicas estuvieran sujetas a la obligación de inclusión universal, esto es, aunque el campo de estudio de la física fuera exhaustivo. Mi tesis no es sino que hay grandes clases de sucesos para los cuales los físicos no muestran ninguna inclinación a *empezar* siquiera a construir aplicaciones detalladas, que por lo mismo no son parte de "la tarea de la física", pero *sí* constituyen las tareas de otras ciencias. En cualquier caso, no queda nada claro que la aplicación de la mecánica cuántica a las moléculas a partir de los años treinta del siglo XX se percibiera como trabajo de los físicos, ni que los resultados de su aplicación por los químicos fuera de la clase exigida por cualquier fisicalismo no trivial (véase Hendry, 2001).

Desde luego, la afirmación de Quine es condicional: *si* el físico sospecha que determinado suceso constituye un contraejemplo, *entonces* complementaría su teoría. Quizá los físicos no tengan tales sospechas, pero esta ecuanimidad debe estar bien fundamentada. Para adaptar un conocido ejemplo de Clifford, supongamos que el capitán de un barco hundido aduce que no sospechaba que su nave no era apta para navegar (1879). Esto no lo exime de responsabilidad en el desastre si no hizo ningún esfuerzo por comprobar su aptitud. No hace falta postular deberes epistémicos generales para ver que el capitán tiene el deber (epistémico) de asegurar que su ecuanimidad está

justificada, porque es una obligación específica que recae en él en virtud de su cargo de capitán. De manera similar, si los físicos ejercen una ciencia cuya clausura se afirma, entonces su confianza de que las ciencias especiales no ofrecen contraejemplos de tal clausura (esto es, hamiltonianos configurativos) debe fundamentarse en pruebas de alguna clase. Por tanto, su ecuanimidad sería irrazonable sin la clase de pruebas que no pudimos encontrar en la última sección.

Field (1992, p. 283) y Smith (1992, p. 40) hacen afirmaciones metodológicas más leves que las de Quine, asignando a los físicos deberes *explicativos* mucho menos onerosos, en vez de predictivos. Field argumenta que la física se dedica a la tarea de asegurar que sus teorías "engranen" con las de ciencias de mayor nivel, y que el "engranaje satisfactorio" entre las teorías físicas y las de mayor nivel requiere explicación: únicamente el reduccionismo puede dar las explicaciones. Un "engranaje" consiste en una microrreducción esbozada y aproximada. Así los deberes explicativos de la física la empujan hacia la reducción de otras ciencias. Según Smith, cualquier fisicalista competente insistirá en que, cuando una teoría de bajo nivel interactúa con una de mayor nivel, debemos ser capaces de usar la de menor nivel para explicar por qué prevalecen los supuestos de la de mayor nivel (1992, pp. 39-40).

Esto parece mucho más admisible: al fin y al cabo, toda la empresa de la química cuántica es usar la mecánica cuántica para recuperar hechos sobre el enlace químico que son bien sabidos por el químico. Si hay engranaje entre la química y la mecánica cuántica, ¿respaldan en verdad al fisicalismo estricto los engranajes e interfaces reales que vimos en la última sección? Sin duda no pueden hacerlo, si son consecuentes con la causación descendente. En cualquier caso, no ocurrió en la explicación del espectro del bióxido de carbono que hubiera dos descripciones teóricas independientes que se compararan y resultaran consecuentes. Quizá eso *constituiría* una explicación de los modelos menos fundamentales. Sin embargo, ni la química ni la mecánica cuántica de hamiltonianos "resultantes" tienen recursos para dar descripciones independientes del espectro del bióxido de carbono. Lejos de una explicación *de* la estructura química *por* la teoría de la física, hubo una empresa conjunta: la explicación de diversos hechos por el uso de la mecánica cuántica aplicada a una estructura molecular dada. No hubo engranaje ni interfaz *entre* la mecánica cuántica y la química, al menos ninguno que requiriera explicación. Lo que hubo fue un ejemplo de la química cuántica: la teoría cuántica de los átomos y las moléculas.[14]

Quizá esto sea demasiado fácil. Quizá la importancia del deber de aplicabilidad universal sea en cuanto motivación y no en cuanto logro: los intentos de unificar campos dispares han motivado algunos de los episodios más ambiciosos y productivos de la historia de la física. La mecánica de Newton, se nos suele decir, fue la síntesis de la física terrestre y la astronómica. De manera más pertinente a la presente discusión, a principios de los años veinte del siglo XX —los últimos años de la antigua teoría cuántica—, los intentos de adecuar los modelos atómicos a los datos espectroscópicos requirieron un variado arsenal de condiciones cuánticas inexplicables e incompatibles entre sí. Pauli y Born, entre otros, vieron en este caos la necesidad de una divergencia radical. La

retrospección nos dice que fue la mecánica cuántica lo que avizoraron, una teoría cuyo atractivo, al menos al principio, radicaba en su poder unificador. A esto siguió una objeción *metodológica* a la aceptación de la discrepancia en la ciencia: peor habría resultado para el progreso subsiguiente si *Heisenberg* se hubiera conformado con la situación de desacuerdo que motivó sus esfuerzos. No obstante, consideremos los detalles: en primer lugar, la mecánica cuántica no hizo más que introducir un nuevo conjunto de discrepancias, como hemos visto; en segundo lugar, la aseveración histórica de que los avances importantes de la física surgen sólo del impulso unificador es a todas luces falsa. En la ciencia normal, las finalidades difieren. Sin embargo, la queja tiene alguna justificación, porque tanto si la mecánica cuántica *realmente* unificó a la física como si no lo hizo, fue un adelanto importante. En retrospectiva, ¿habríamos aconsejado en verdad a Pauli, Heisenberg y Born que se conformaran con la antigua teoría cuántica?; pero esta queja es *sólo* metodológica. Si bien es cierto que las expectativas de unidad a veces son fecundas, esto no implica la verdad de la metafísica reduccionista subyacente. La fecundidad de un propósito no lleva en sí su logro.[15] Tampoco debe cegarnos a las discrepancias en la ciencia.

Conclusión

Terminaré con un contraste familiar entre dos versiones de la relación entre física y ciencias especiales. Por una parte está el relato del fisicalista: las ciencias especiales estudian regularidades de alcance limitado, y aunque las relaciones rara vez son claras, las entidades y propiedades que estudian dependen de entidades y propiedades físicas. No obstante, los procesos causales fundamentales son todos físicos y obedecen a unas cuantas leyes físicas. Por otra parte está la versión pluralista, en la cual la ley física no determina por completo el comportamiento de las clases de sistemas estudiados por las ciencias especiales. Según esta opinión, aunque la misma abstracción de las teorías físicas parece indicar que podrían, en principio, considerarse aplicadas a sistemas de ciencias especiales, su aplicabilidad es o bien trivial (y en consecuencia no informativa), o bien, si no es trivial, la naturaleza de la investigación científica es tal que no hay razón alguna para esperar que las aplicaciones pertinentes sean exactas en sus predicciones. Aunque la versión del pluralista es moderna, la descripción de Broad del emergentismo tiene un asombroso parecido con ella.

Ahora bien, parecería que la química es la clase de disciplina en la cual las afirmaciones de dependencia del fisicalista son menos admisibles, pero esta apariencia es engañosa: las razones para suponer que lo químico depende de lo físico son, *en el mejor de los casos*, sólo *tan buenas como* las razones para pensar que lo biológico, lo mental y demás tienen la misma dependencia, en la medida en que "físico" se toma como término contrastivo, que separa lo físico de (digamos) lo biológico o lo mental. En ese contexto, es natural si lo físico se interpreta en sentido amplio como lo "fisicoquímico" (haciendo trivialmente verdaderas las afirmaciones de dependencia del "fisicalista" sobre lo químico). Las afirmaciones de dependencia dirigidas a estas otras disciplinas quizá gocen del apoyo adicional de afirmaciones basadas en principios como las encarnadas (por ejemplo) por la concepción funcionalista de lo mental, sobre conceptos que caracterizan el discurso dentro de estas disciplinas, conceptos que también ayudan a separar sus campos de lo físico (en sentido amplio) de maneras basadas en principios. A falta de argumentos que recurran a tales conceptos característicos, la dependencia de lo químico respecto de lo físico debe condicionarse solamente a la admisibilidad de las afirmaciones sobre la generalidad de la física. El tema principal de mi argumento ha sido que el fisicalismo estricto fracasa porque desvirtúa los detalles de la explicación física.

BIBLIOGRAFÍA

Atkins, P. W., *Physical Chemistry*, 3ª ed., Oxford University Press, Oxford, 1986.

Broad, C. D., *The Mind and its Place in Nature*, Paul Kegan, Trench and Trubner, Londres, 1925.

Cartwright, N., *How the Laws of Physics Lie*, Clarendon Press, Oxford, 1983.

———, *The Dappled World*, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.

Clifford, W. K., "The Ethics of Belief", en *Lectures and Essays*, vol. II, MacMillan, Londres, 1879.

Crane, T., "Why Indeed?", *Analysis*, vol. 51, núm. 1, 1991, pp. 32-37.

———, y D. H. Mellor, "There is No Question of Physicalism", *Mind*, vol. 99, núm. 394, 1990, pp. 185-206.

Field, H., "Physicalism", en J. Earman (ed.), *Inference, Explanation and Other Frustrations: Essays in the Philosophy of Science*, University of California Press, Berkeley, 1992, pp. 271-291.

Giere, R. N., *Explaining Science: A Cognitive Approach*, University of Chicago Press, Chicago, 1988.

Hendry, R. F., "Realism and Progress: Why Scientists Should be Realists", en R. Fellows (ed.), *Philosophy and Technology*, Cambridge University Press, Cambridge, 1995, pp. 53-72.

———, "Models and Approximations in Quantum Chemistry", en N. Shanks (ed.), *Idealization in Contemporary Physics*, Rodopi, Amsterdam y Atlanta, 1998, pp. 123-142.

———, "Molecular Models and the Question of Physicalism", *Hyle*, vol. 5, núm. 2, 1999, pp. 117-134.

———, "Mathematics, Representation and Molecular Structure", en U. Klein (ed.), *Tools and Modes of Representation in the Laboratory Sciences*, Kluwer, Dordrecht, 2001, pp. 221-236.

Horgan, T., "From Supervenience to Superdupervenience: Meeting the Demands of a Material World", *Mind*, vol. 102, núm. 408, 1993, pp. 555-586.

Kim, J., "Supervenience, Emergence and Realization in the Philosophy of Mind", en M. Carrier y P. K. Machamer (eds.), *Mindscapes: Philosophy, Science, and the Mind*, Universitätsverlag Konstanz, Constanza, 1997, pp. 271-293.

Knight, D. M., *Ideas in Chemistry: A History of the Science*, 2ª ed., Athlone, Londres, 1995.

Lakatos, I., "Falsification and the Methodology of Scientific Research Programmes", en I. Lakatos y A. Musgrave (eds.), *Criticism and the Growth of Knowledge*, Cambridge University Press, Cambridge, 1970, pp. 91-196.

McLaughlin, B., "The Rise and Fall of British Emergentism", en A. Beckermann, H. Flohr y J. Kim (eds.), *Emergence or Reduction? Essays on the Prospects for Non-Reductive Physicalism*, Walter de Gruyter, Berlín, 1992, pp. 49-93.

Oppenheim, P., y H. Putnam, "Unity of Science as a Working Hypothesis", en H. Feigl, M. Scriven y G. Maxwell (eds.), *Minnesota Studies in the Philosophy of Science*, vol. II, University of Minnesota Press, Minneapolis, 1958, pp. 3-36. [Los números de página corresponden a la reimp. en R. Boyd, P. Gasper y J. Trout (eds.) *Philosophy of Science*, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1991, pp. 405-427.]

Papineau, D., "Why Supervenience", *Analysis*, vol. 50, núm. 2, 1990, pp. 66-71.

———, "The Reason Why", *Analysis*, vol. 51, núm. 1, 1991, pp. 37-40.

———, "The Rise of Physicalism", en M. Stone y J. Wolff (eds.), *The Proper Ambition of Science*, Routledge, Londres, 2000, pp. 171-208.

Quine, W. V., "Goodman's Ways of Worldmaking", *Theories and Things*, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1981, pp. 96-99.

Scerri, E., “Has Chemistry Been at least Approximately Reduced to Quantum Mechanics?”, *Proceedings of the Philosophy of Science Association 1994*, vol. 1, Asociación para la Filosofía de la Ciencia, East Lansing, Michigan, 1994, pp. 160-170.

Silverstein, R. M., G. C. Bassler y T. C. Morrill, *Spectrometric Identification of Organic Compounds*, 4ª ed., Wiley, Nueva York, 1981.

Smith, P., “Modest Reductions and the Unity of Science”, en D. Charles y K. Lennon (eds.), *Reduction, Explanation, and Realism*, Clarendon, Oxford, 1992, pp. 19-43.

Steinfeld, J., *Molecules and Radiation*, 2ª ed., MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1985.

Stephan, A., “Emergence: a Systematic View on its Historical Facets”, en A. Beckermann, H. Flohr y J. Kim (eds.), *Emergence or Reduction? Essays on the Prospects for Non-Reductive Physicalism*, Walter de Gruyter, Berlín, 1992, pp. 25-48.

Woolley, R., “Quantum Theory and Molecular Structure”, *Advances in Physics*, vol. 25, núm. 1, 1976, pp. 27-52.

———, “Quantum Chemistry Beyond the Born-Oppenheimer Approximation”, *Journal of Molecular Structure* (THEOCHEM), vol. 230, 1991, pp. 17-46.

———, “Is there a Quantum Definition of a Molecule?”, *Journal of Mathematical Chemistry*, vol. 23, núms. 1-2, 1998, pp. 3-12.

———, y B. Sutcliffe, “Molecular Structure and the Born-Oppenheimer Approximation”, *Chemical Physics Letters*, vol. 45, núm. 2, 1977, pp. 393-398.

---

[*] Departamento de Filosofía, Universidad de Durham, 50 Old Elvet, Durham DH1 3HN Reino Unido. Dirección electrónica: r.f.hendry@durham.ac.uk

[1] Véase una influyente aseveración de este punto de vista en Horgan (1993, sección 1).

[2] Usaré dependencia y determinación como términos inversos. También me disculpo de antemano por recurrir a relaciones de dependencia y causales entre hechos, sucesos, propiedades y entidades indistintamente, como parece adecuarse al contexto.

[3] Véanse discusiones al respecto en Crane y Mellor (1990, secciones 1 y 2), Papineau (1990, 1991) y Crane (1991). David Knight (1995, caps. 5 y 12) refiere las cambiantes opiniones sobre el lugar de la química en la jerarquía de las ciencias.

[4] Se ha argumentado, no obstante, que la superveniencia no es en sí una relación de dependencia, sino sólo una covarianza modalizada de propiedades. Según esta opinión es, a lo sumo, el *signo* de la dependencia ontológica asociado con ella como la correlación lo está con la causación; véase Horgan (1993).

[5] Una noción relacionada pero distinta de reducción es la referida a un logro cuantificable de la explicación interteórica. Sobre este uso véase, por ejemplo, Scerri (1994).

[6] En los ubicuos argumentos de la sobredeterminación, suele ser una premisa no reconocida: la existencia de causación mental genuina no podría implicar *sobre*determinación a menos que la estructura física del mundo sea suficiente para determinar el curso de acontecimientos físicos, en la medida en que están determinados.

[7] Broad también argumentó que si bien los cuerpos macroscópicos sólo *parecían* tener cualidades irreductiblemente macroscópicas, persistía para el mecanicismo puro el problema de explicar esta apariencia (1925, p. 49).

[8] Las leyes de las ciencias especiales del emergentista son fundamentales en que la ocurrencia del

comportamiento que describen no está determinada por leyes más generales. Las leyes muy generales de la mecánica conservan su estatus especial, porque conservan su aplicabilidad a los sistemas cuyo comportamiento emergente no pueden determinar por completo.

[9] A partir de aquí usaré el término de McLaughlin “configurativo” como contraste de “resultante” (1992, p. 52).

[10] Nótese, sin embargo, que las identidades de propiedad de Kim son por sí solas insuficientes para descartar la causación descendente. Lo que se requiere, además, es la compleción causal de la física con respecto a los sistemas dentro de los cuales se ejemplifican las propiedades físicas que realizan estas propiedades de segundo orden.

[11] Véanse en Cartwright (1983) argumentos en favor de la primera y la tercera tesis, y en Cartwright (1999, cap. 1) argumentos en pro de la segunda.

[12] Restricción que parecerían aceptar McLaughlin (1992) y Papineau (2000).

[13] Véase una discusión al respecto en Woolley (1976). La distinción es particularmente simple en mecánica cuántica, porque la formulación del hamiltoniano proporciona ya una ley de combinación para las distintas clases de interacción. Por tanto, no hay necesidad de un paralelogramo de fuerzas separado.

[14] La química cuántica es de hecho una teoría distinta, si las teorías complejas se individualizan en parte por sus modelos (como argumentan, por ejemplo, Cartwright, 1983, y Giere, 1988), y la química cuántica utiliza un conjunto de hamiltonianos propio y distintivo, que es lo que he venido argumentando. En otro trabajo busqué un entendimiento metodológico de cómo surgió esta distintividad (véase Hendry, 2001).

[15] En otro trabajo argumenté en favor de una separación parecida de afirmaciones metodológicas y conclusión filosófica en el caso del realismo científico; véase Hendry, 1995.

X. LA FÍSICA EN EL CRISOL DE LA QUÍMICA

Fronteras ontológicas y modelos epistemológicos

G. K. Vemulapalli[*]

Introducción

La física y la química son dos áreas íntimamente relacionadas de la ciencia. Los adelantos de la física han tenido una profunda influencia en la química. Incluso un examen superficial de la historia de ambas ciencias muestra que muchos avances importantes de la química se produjeron como consecuencia de la física. Esto no es de extrañar considerando que la física se ocupa de las leyes y teorías que rigen la materia y la energía, mientras que la química estudia las propiedades de los materiales y las transformaciones de la materia y la energía. Sin embargo, los adelantos de la química no son meras extensiones de ideas concebidas en la física. Además, las teorías fisicoquímicas usadas para explicar los nuevos avances tampoco son extensiones lógicas de las teorías de la física. Como lo indican varios estudios realizados en años recientes (véanse Scerri, 2000, y otras obras citadas en este artículo), la química no se reduce a la física, salvo en un sentido ontológico restringido. Paradójicamente, la química tiene una fuerte dependencia respecto de la física y, al mismo tiempo, es independiente de ella. Esto plantea una importante pregunta sobre las leyes fundamentales de la física: ¿cuál es la naturaleza de las leyes de la física que se encuentran en la base de muchos adelantos importantes de la química (el estudio de la materia), y que aun así no pueden subsumir los conceptos químicos que surgen en la aplicación de ellas mismas al comportamiento de la materia?

Mi objetivo primario es mostrar cómo la física y la química interactúan al aportarnos el entendimiento que hoy tenemos del enlace químico. Quiero establecer los aspectos "fácticos" de la relación entre ambas ciencias sin ninguna referencia, en un principio, a lo que otros investigadores han especulado sobre esta relación. Hecho esto, mostraré que las leyes de la física pertinentes a la química son enunciados de limitaciones. Definen una frontera dentro de la cual las leyes y teorías químicas son válidas, y más allá de la cual pierden todo sentido. Dentro de las fronteras, las leyes de la física no dictan lo que es real, ni ofrecen una ruta clara que vincule las teorías y leyes de la física con las aplicables a la química. Estas últimas tiene que establecerlas la investigación química entre las muchas posibilidades que hay dentro de las fronteras fijadas por la física.

Volveré a estos puntos después de examinar algunos ejemplos de interdependencia de la química y la física, ejemplos que permiten enfocar nítidamente la pregunta que hemos planteado.

Los grandes adelantos de la física a menudo cambian el rumbo de la investigación química. Afectan en particular *i*) los tipos de experimentos; *ii*) el vocabulario utilizado para describir fenómenos químicamente significativos; *iii*) las explicaciones que se dan de los fenómenos, e incluso *iv*) los temas de investigación que se consideran importantes. Veamos ejemplos característicos.

i) Algunos de los datos más importantes en química son las masas molares relativas (MMR), ya que sin ellas no pueden sacarse conclusiones cuantitativas sobre la composición o la reactividad químicas. Las MMR se determinan hoy por espectroscopia de masas, a partir de las propiedades coligativas y por la aplicación de la ley de los gases ideales. Cada una de estas técnicas depende de conceptos y teorías de la física. De hecho, estas técnicas no habrían llegado al laboratorio de química de no haber sido por la interpretación que la teoría física ofrece. ¿Qué incentivo habría para que los químicos (o bioquímicos) determinaran, por ejemplo, la presión osmótica de una solución si no hubiera vínculos establecidos termodinámicamente entre ella y la masa molar del soluto?

Las MMR de pequeño y mediano tamaño pueden determinarse con métodos puramente químicos que no dependen de la teoría física. La muy confiable técnica gravimétrica constituye un ejemplo de tales métodos. El que un asiduo practicante de esta técnica, T. W. Richards, recibiera en 1914 el Premio Nobel de Química ilustra el papel decisivo que el procedimiento ha desempeñado en el desarrollo de esta ciencia. Hoy en día, sin embargo, son métodos físicos los que se emplean más comúnmente en el laboratorio químico.

En años recientes la investigación química ha llegado a depender cada vez más del instrumental. En muchos casos no basta una observación superficial para distinguir entre laboratorios de investigación física o química. Entre la plétora de instrumentos que atestan los modernos laboratorios químicos se cuentan diversos tipos de espectrómetros, aparatos de alto vacío para estudios de haces moleculares, difractómetros de rayos X y de electrones, máquinas para estudios de superficie y detectores de una multiplicidad de señales. A diferencia de las computadoras en aplicaciones empresariales, estos instrumentos no se emplean en el laboratorio químico como meras herramientas, excepto en la determinación sistemática de la cantidad de materiales por métodos estándar. Por el contrario, las teorías de la física cumplen una función central en el diseño de los experimentos con estos instrumentos y en la interpretación de los datos reunidos con tales experimentos.

ii) Los químicos ya no usan palabras como "afinidad" y "valencia" para describir el enlace químico. Estos términos se sustituyen por "solapamiento de orbitales", enlaces "sigma" y "pi", palabras que no pueden definirse fuera del contexto teórico cuántico. Incluso un término como "resonancia", cuyo empleo en química antecede a la teoría cuántica, ha adquirido un significado muy distinto desde la introducción de esta teoría. La resonancia, como la concibieron en primer lugar los químicos orgánicos, es la posibilidad de existencia simultánea de diferentes estructuras de una molécula. En cambio,

resonancia en mecánica cuántica es una consecuencia de la indistinguibilidad de partículas elementales (electrones en la teoría del enlace). De hecho, si hubiéramos de listar las palabras vinculadas con conceptos esenciales de química analítica, inorgánica o física, encontraríamos que muchas de ellas deben su sentido actual a teorías de la física, y desprovistas de ese contexto teórico pierden su significado.

iii) La explicación moderna del enlace químico depende de la naturaleza ondulatoria del electrón y suele empezar por los orbitales atómicos (OA). (Nos interesa únicamente la descripción elemental del enlace. Los lectores no familiarizados con este tema encontrarán informativo y gratificante el excelente libro de Coulson.) En el método de orbitales moleculares, los OA de diferentes átomos se suman (con coeficientes apropiados) y luego se generan los productos de los orbitales moleculares (OM) resultantes, llamados configuraciones. El enlace y los espectros se explican en relación con estas configuraciones (o con sus sumas lineales, en caso de degeneración). En el método de enlace de valencia, los productos de los OA de diferentes átomos, productos que se supone representan distintas estructuras de resonancia, se suman para obtener las funciones de onda. Tanto la teoría de OM como la del enlace de valencia exigen un tipo muy distinto de explicación del enlace químico que el que ofrecen las teorías basadas en el modelo de partícula del electrón, desarrollado antes del advenimiento de la mecánica cuántica por parte Lewis, Langmuir y Kossel. La preferencia actual de los químicos por la explicación que brinda la teoría cuántica sobre la de la teoría de las partículas se justifica señalando que la primera da una descripción cuantitativa del enlace. Sin embargo, la teoría cuántica también se emplea para dar una explicación cualitativa del enlace, aunque no ofrece un conocimiento más profundo que la teoría de las partículas. La naturaleza de la explicación del enlace ciertamente ha cambiado a partir del desarrollo de la teoría cuántica. Parte del motivo del cambio —así parece a juzgar por el razonamiento que antecede— fue hacer consecuente la explicación química con la teoría física.

iv) En años recientes, el interés en la cinética química se ha trasladado al área de la dinámica de estados, donde se investigan la disociación de una sola molécula o la reacción de pares de moléculas preparadas en estados cuánticos específicos. Esta investigación avanza en un rumbo marcadamente distinto del que siguen las investigaciones clásicas (que siguen interesando a la mayoría de los químicos), y en ella se estudia la dinámica de las moléculas distribuidas en muchos estados de energía. El ímpetu de la cinética de estados procede del desarrollo de técnicas de haces moleculares y teorías de dispersión en física. Aunque estas investigaciones pueden dar una explicación reduccionista de la teoría de algunas reacciones en fase gaseosa entre moléculas relativamente simples, no es probable que desempeñen un papel significativo en áreas mucho más amplias que la cinética de moléculas grandes o reacciones en solución, donde todavía falta responder muchas preguntas importantes. Lo anterior se debe a que la densidad de los estados de energía de las moléculas grandes, y de las moléculas en solución, es tan alta que estos sistemas, en esencia de naturaleza clásica, están desprovistos de energías cuantizadas. Así, queda claro que el interés por la cinética

de estados surgió como área importante de investigación principalmente a causa de los desarrollos de la física.

Los ejemplos expuestos ilustran ampliamente la fuerte influencia que la física ejerce sobre la química. El comentario de Bunsen fue muy agudo: “Un químico que no es también físico, no es nada” (Schlag, 1998). De las principales áreas de la química (estructura molecular, propiedades de las sustancias, reactividad y síntesis), sólo la síntesis sufre una afectación mínima de la física. Cuando los químicos sintetizan moléculas nuevas, sobre todo en el área de la química orgánica, suelen seguir su propio conjunto de reglas antes que depender de las leyes y teorías de la física.

La influencia de la química sobre la física es menos directa. Ha habido importantes investigaciones químicas que dieron lugar a adelantos en la física. El descubrimiento de la tercera ley de la termodinámica fue consecuencia de los estudios de Nernst del equilibrio químico a bajas temperatura. Los estudios químicos sin duda desempeñaron un importante papel en las primeras etapas del desarrollo del electromagnetismo. De hecho, fueron las investigaciones electroquímicas de Faraday las que llevaron a G. J. Stoney a acuñar la palabra “electrón” y calcular su carga (1874), antes de que J. J. Thomson lo detectara en fase gaseosa (1897). A esta lista debemos añadir la teoría atómica moderna, que echó raíces en la química antes de trasladarse a la física.

Las investigaciones químicas, sin embargo, por lo general han planteado preguntas en física sin alterar marcadamente el rumbo de la investigación en esta ciencia.

La relación asimétrica entre la física y la química ha llevado a algunos científicos y filósofos a pensar que la química es reductible a la física. Tarde o temprano, algunas ecuaciones de la física acabarán por explicar todos los fenómenos químicos. Lo único que les queda a los químicos es seguir las reglas de la física conforme se adentran poco a poco en las partes aún desconocidas de su ciencia. Tal es la impresión que nos da la muy citada declaración de Dirac (1929): "Las leyes físicas fundamentales necesarias para la teoría matemática de gran parte de la física y la *totalidad de la química* [cursivas mías] se conocen, pues, perfectamente, y la única dificultad estriba en que las aplicaciones exactas de estas leyes llevan a ecuaciones demasiado complicadas para ser solubles".

La primera parte del enunciado quizá no sea falsa, por ofensiva que pudiera resultar a algunos químicos. Sin embargo, no es una declaración útil para investigar la relación entre la física y la química. Es algo así como decirle a un turista que pregunta cómo llegar a un sitio en un país extraño que la ley *necesaria* —que él no tiene más que dos posibilidades de movimiento— no está en discusión. Sabemos que la ley no será infringida, pero esto no es de utilidad para hallar el destino. La segunda parte del enunciado de Dirac es engañosa. Implica que los fenómenos químicos se explicarán por completo (o se minimizarán con excusas) si las ecuaciones deducidas de las leyes necesarias pueden resolverse. Queda claro que esta idea es seriamente defectuosa cuando examinamos más de cerca la relación entre física y química. Consideraré un área de contacto entre física y química —la química cuántica— para mostrar la compleja relación entre ambas disciplinas. Un artículo anterior (Vemulapalli y Byerly, 1999) examinaba la termodinámica clásica y la termodinámica estadística.

El concepto de enlace químico es esencial en química. Su importancia salta a la vista cuando consideramos que el número de moléculas que los químicos conocen es $>10^6$, mientras que los tipos de enlace necesarios para explicar la variación de sus propiedades (aproximada pero cuantitativamente) son muy pocos, de una a dos docenas, incluidos los tipos poco comunes. Dado el número y los tipos de átomos de una molécula, un químico suele ser capaz de predecir (con base en una idea de los enlaces entre átomos) la geometría molecular y clasificar la molécula como polar o no polar. Esto quizá no sea tan sofisticado como predecir la órbita de un planeta a partir de las leyes de Newton. Sin embargo, si se considera el número de casos subsumidos por la teoría del enlace químico, resulta un logro extraordinario, con muy pocos parangones en los anales de la investigación científica.

Aun así, "enlace químico" nunca podrá elevarse al rango de concepto cuantitativo preciso, por la sencilla razón de que la energía molecular total no es una suma de las interacciones entre los vecinos más próximos. Considérese la descripción del enlace de la molécula del agua que dan los libros de química. El oxígeno y los dos átomos de hidrógeno forman un triángulo simétrico con las distancias O-H de 95.8 pm y la distancia H-H de 152 pm. Los dos enlaces químicos se indican con líneas que unen el oxígeno central con cada átomo de hidrógeno. Como se induce a creer a todo estudiante de

química de primer año, no hay enlace entre los dos átomos de hidrógeno. Sin embargo, es imposible defender el supuesto de que hay una fuerte interacción entre dos átomos distantes 95.8 pm y no hay ninguna entre dos átomos distantes 152 picómetros.

La descripción, por desgracia, no mejora agregando un enlace entre los dos átomos de hidrógeno. La energía total de una molécula, que puede tener muchos más átomos que tres, no puede expresarse como una suma de las energías de pares de átomos, ni aun de conglomerados de átomos en la molécula. La energía potencial entre moléculas (o átomos libres) puede expresarse, al menos en principio, como una suma de las energías de conglomerados que interactúan (expansión en cluster de Mayer) porque las moléculas están localizadas. Dentro de una molécula, sin embargo, los electrones están deslocalizados. Por eso la energía no puede dividirse ni siquiera en principio.

Resulta interesante que los químicos —a diferencia de los físicos y los biólogos que analizan a fondo las aproximaciones importantes de sus teorías— no hayan tratado de justificar el supuesto de que no hay enlaces sino en un número limitado de pares de átomos de una molécula, un supuesto tan esencial en química. En vista de lo anterior, la idea de un enlace químico distinto, claramente definido, considerando su inmensa utilidad en investigación química, quizá se considere, a lo más, un prejuicio benévolo.

La teoría cuántica cumplió y sigue cumpliendo una función decisiva en la explicación de la naturaleza del enlace químico. De hecho, la primera teoría cuantitativa del enlace químico, desarrollada por Heitler y London, siguió inmediatamente al advenimiento de la ecuación de Schrödinger. Desde entonces, la teoría cuántica ha dado valiosos cálculos cuantitativos de energías de enlace y conocimiento de geometrías moleculares. También condujo al refinamiento de importantes conceptos como los de valencia libre, energía de resonancia y orden de enlace (Coulson, 1962). Sin embargo, la aplicación de la teoría cuántica a la química es muy distinta, en su metodología, de la aplicación, digamos, de las leyes de Newton a las órbitas planetarias. En este último caso se calculan, mediante el uso de algunas aproximaciones, los valores numéricos de una de las variables que figuran en la teoría. Por ejemplo, la distancia radial del planeta aparece como variable en las fórmulas matemáticas de energía y fuerza potenciales. Así, podemos decir que la teoría de Newton proyecta, por medio de cálculos, la información de cantidades que forman parte del marco teórico. En cambio, cuando la teoría cuántica se aplica a la química, las cantidades de las cuales buscamos información no son las que figuran en la ecuación de Schrödinger. Las posiciones y los momentos, aun en sentido probabilístico, no tienen significación en la teoría del enlace químico. Las funciones de onda de la ecuación de Schrödinger para sistemas polielectrónicos es una absoluta incógnita. Ni la energía ni la longitud de enlace son propiedades cuantizadas. No hay variables representativas de ellas en las formulaciones de Schrödinger, Heisenberg o Dirac de la teoría cuántica.

El asunto principal es éste: las aplicaciones de la teoría cuántica al enlace químico implican el cálculo de cantidades que no tienen representación ni situación relativa en la teoría original. Por lo mismo, deben plantearse muchos supuestos extracuánticos para adaptar la teoría básica a la forma que resulta útil en química. En términos generales hay tres tipos de supuestos al aplicar la teoría cuántica al enlace químico. El primer tipo

puede justificarse sobre bases teóricas aunque éstas no sean parte de la teoría original. El segundo conjunto de supuestos es neutral con respecto a la teoría. La teoría admite varios estilos equivalentes de interpretación del enlace, pero los químicos eligen un estilo particular. El tercer conjunto de supuestos de hecho contradice la teoría original, por lo menos en la intención con que se formuló. Examinemos cada caso por separado.

i) Las funciones de onda usadas en química cuántica no son las soluciones analíticas de la ecuación de Schrödinger correcta, la ley básica de la teoría cuántica. Se obtienen añadiendo juiciosamente un conjunto de funciones matemáticamente pertinentes. En el lenguaje de los teóricos cuánticos, son superposiciones de conjuntos familiares de funciones de base que pueden o no ser funciones propias de cualquier hamiltoniano, el operador cuántico de la energía que ocupa el centro de la ecuación de Schrödinger. Este procedimiento se justifica porque es posible aproximar a cualquier función deseada en una región del espacio una suma de otras funciones (conjunto de base) en la misma región. (Si el conjunto de base es un conjunto completo, la función deseada es idéntica a la solución exacta.) En la práctica, sin embargo, el cálculo con un conjunto de base completo es una imposibilidad. De ahí que los cálculos quimicocuánticos se hagan con un conjunto muy truncado, a menudo constituido por funciones que no tienen todas las propiedades matemáticas requeridas y casi siempre con un operador de energía aproximado. Además, se hacen varios supuestos al obtener los factores de ponderación en el total (superposición).

Como los cálculos se hacen con las funciones aproximadas, el principio variacional se utiliza como criterio para juzgar el mérito de los cálculos quimicocuánticos. Según este principio, la energía calculada nunca puede ser inferior a la del estado de mínima energía de una simetría dada. Gracias a este principio los químicos pudieron "experimentar matemáticamente" con una variedad de funciones elegidas arbitrariamente y con distintos hamiltonianos aproximados, y encontrar las técnicas que dan la menor energía posible. Se da por supuesto entonces que la función que da la mínima energía es la mejor aproximación a la verdadera función de onda y se usa en adelante para computar otras propiedades de la molécula. El interés del químico experimental está en las propiedades y no en la energía total de las moléculas. No hay garantía de que una función de onda que da el mejor cálculo de la energía dé también los mejores cálculos de otras propiedades, pero este procedimiento se sigue por falta de alternativas. Menciono esto para indicar que los cálculos quimicocuánticos implican no sólo muchas aproximaciones, sino supuestos adicionales al vincular los resultados teóricos con las observaciones experimentales.

Mi intención no es denigrar los cálculos quimicocuánticos, ni las interpretaciones cualitativas y cuantitativas basadas en ellos, ya que dependen de algunos supuestos necesarios. La importancia de estos cálculos para la química es insoslayable. Los cálculos cuánticos ahora rivalizan con las mediciones experimentales precisas, y la química cuántica ofrece un recurso invaluable de datos que no se pueden obtener fácilmente en el laboratorio. La química cuántica también proporciona el marco teórico para interpretar datos que de otra manera resultan dispares.

No obstante, se debe insistir en que las relaciones epistemológicas y teóricas entre las

leyes cuánticas y las explicaciones quimicocuánticas del enlace están muy lejos del razonamiento deductivo; no son meras extensiones de las reglas cuánticas a la química. No se ajustan a un modelo reductivo de relación entre física y química.

La metodología que subyace al desarrollo de la química cuántica es muy distinta del desarrollo de la física a partir de las leyes de Newton. El oxímoron "teoría inductiva" es el que mejor describe la metodología que se sigue al adaptar la mecánica cuántica a la química. Para unas cuantas moléculas de cada clase, los químicos cuánticos encuentran por ensayo y error el mejor conjunto de aproximaciones del hamiltoniano, el conjunto base truncado, la evaluación de elementos de matriz y otras varias entidades teóricas. Después usan la "teoría" (como llaman a un conjunto de aproximaciones) así desarrollada para otras moléculas de la misma clase. (Por ejemplo, la popular teoría de Hückel implica ignorarlo casi todo, menos el número mínimo de integrales, y obtener aproximaciones del resto a partir de consideraciones empíricas.) Este razonamiento no difiere de aquel que con base en repetidas observaciones lleva a la conclusión de que todos los cisnes son blancos, salvo que la inducción está en el conjunto de aproximaciones que dan resultados confiables para una clase de moléculas y no en el color de una especie de ave.

Max Born escribió: "Creo que en la ciencia no hay autopistas filosóficas con señales epistemológicas. No, estamos en la selva y nos orientamos por ensayo y error, construyendo un camino que dejamos *atrás* conforme avanzamos. No *encontramos* señales en las encrucijadas, sino que nuestros exploradores las *instalan* para ayudar a los demás" (Born, 1956). Esta declaración, con las cursivas puestas por el propio Born, está muy cerca de describir la metodología que se usa hoy en el desarrollo de la teoría cuántica de los enlaces químicos.

ii) La combinación de OA en un mismo átomo se conoce como "hibridación" en química. El concepto de hibridación desempeña un papel muy importante en química orgánica e inorgánica, ya que permite a los químicos visualizar los enlaces y, por tanto, la geometría de una molécula. La distribución de cargas electrónicas en un átomo tiene simetría esférica. Sin embargo, podemos inducir una distribución de cargas dirigida, apropiada para la formación de enlaces orientados espacialmente, agregando juiciosamente OA. Aun así, hay cierta confusión sobre el estatus teórico del concepto de hibridación. (Coulson es una buena fuente para los lectores interesados en conocer la mecánica de la hibridación.) Considérese el conjunto de orbitales de hidrógeno de número cuántico $n = 2$. El conjunto de cuatro funciones está constituido por tres de simetría p y una de simetría s. Como estas funciones son degeneradas, cualquier combinación lineal de ellas es una representación igualmente buena del nivel $n = 2$ del átomo de hidrógeno. Así, en caso de degeneración, los orbitales híbridos equivalen a los orbitales de hidrógeno normales, que son producto de los armónicos esféricos y los polinomios asociados de Laguerre. No se necesita ningún agente causal para hibridar los orbitales. Considerar híbrido o no híbrido un conjunto de orbitales es cuestión de elección.

Consideremos ahora una configuración electrónica de capa cerrada como la del átomo

de neón. La función de onda electrónica total es un determinante de Slater de 10 filas y 10 columnas, si el espín se muestra expresamente. Supongamos que escribimos el determinante de Slater de tal manera que cada fila corresponde a uno de los orbitales de espín. Como añadir filas (con factores de ponderación apropiados) no cambia el determinante, los orbitales híbridos y no híbridos son representaciones equivalentes de la función de onda electrónica total. Se pueden usar argumentos similares para mostrar que hay varias representaciones equivalentes para los orbitales de un átomo enlazado. El uso de la representación orbital híbrida, aunque no es inconsecuente con la teoría cuántica básica, no se sigue de ella. Conviene desde luego empezar con orbitales híbridos para describir los enlaces entre los átomos. También se ajusta a las opiniones tradicionales de enlaces dirigidos desarrolladas por Van't Hoff y Le Bel. El enlace químico no es un agente causal de la hibridación como los libros de texto a menudo se afanan en explicar. La hibridación tampoco es consecuencia de las leyes cuánticas.

iii) Los químicos juzgan útiles ciertos conceptos como "porcentaje de carácter iónico del enlace" y "electronegatividad de los átomos" para clasificar las moléculas según su polaridad. Estos conceptos se aplican a modelos que no son consecuentes con la lógica cuántica, aunque suelen describirse en los libros de química cuántica junto a funciones de onda, elementos de matriz y otras herramientas de cálculo cuántico. Consideremos lo que se requiere para definir el carácter iónico porcentual en términos puramente mecánico cuánticos. Toda la información sobre un sistema, según la teoría cuántica, está codificada en su función de onda. Por tanto, para identificar el carácter iónico de un enlace debemos hallar el factor de ponderación del componente iónico de la función de onda. Hecho esto, sin embargo, encontramos que no es ortogonal con respecto al componente covalente en el cual los electrones son compartidos por igual entre los dos átomos. Así, los caracteres iónico y covalente no son independientes el uno del otro; uno implica el otro. La idea principal es que los químicos encuentran muy útil suponer distintos caracteres iónico y covalente de un enlace para describir propiedades de una molécula y para compararlas con propiedades de otras moléculas. En la teoría cuántica, sin embargo, los conceptos de enlaces covalentes y iónicos no pueden separarse en conceptos mutuamente excluyentes. No hay una manera consecuente de suplir esta diferencia. Dada esta situación, los químicos no han abandonado la noción de carácter iónico distinto de un enlace. En vez de ello han adaptado la teoría —es más apropiado decir que la han distorsionado— a sus fines redefiniendo las reglas de interpretación, sin olvidar que en este contexto la teoría cuántica puede, a lo sumo, dar directrices de interpretación cualitativa. Ésta es precisamente la metodología seguida por L. Pauling, R. S. Mulliken, C. A. Coulson y otros precursores que adaptaron la teoría cuántica a la química.

Cuando examinamos la relación entre dos disciplinas de la ciencia, es útil contrastar lo que se postula provisionalmente con lo que se ha aceptado como fundamental. Al fin y al cabo la ciencia es una empresa dinámica que reúne nueva información al tiempo que descarta o modifica hipótesis antes aceptadas y cambia su interpretación de hechos observados. Los científicos elaboran muchas hipótesis sumamente especulativas en el proceso de desarrollo de las teorías; algunas de ellas subsisten, mientras que otras caen a la orilla del camino. La colorida expresión de Feyerabend (1970) de que "todo vale" no está lejos de la realidad durante el desarrollo inicial de las hipótesis científicas. Sin embargo, una vez que la comunidad científica ha aceptado las hipótesis y teorías —siempre de manera tentativa—, se empiezan a distinguir las vinculaciones espurias de las asociaciones sistemáticas y las relaciones dictadas por la lógica de los paralelos accidentales.

Durante la segunda mitad del siglo pasado el conocimiento científico se expandió a un ritmo sin precedente en la historia del pensamiento. En consecuencia, hoy es prácticamente imposible que alguien tenga una visión panorámica de al menos una pequeña parte de la ciencia, y mucho menos de su totalidad. El cambio constante supone que sea un triunfo incluso mantenerse al día en la propia especialidad. Por lo mismo, las áreas de especialidad de los científicos son necesariamente estrechas y los aíslan de todo menos de un puñado de otros científicos que trabajan en campos íntimamente relacionados. Si se equipara a un estudioso de las humanidades con una persona que tiene una visión impresionista de un paisaje abierto, el científico es como un minero extraordinariamente calificado a quien se confina a la exploración de una pequeña región.

Muchas ideas sobre el enlace químico están firmemente establecidas en la actualidad, después de más de un siglo de investigaciones que siguieron al descubrimiento del electrón; son aceptadas por científicos de muy diversas áreas de especialización. Hoy podemos distinguir con certeza entre hipótesis transitorias y aquellas con cierto grado de estabilidad. Hecho lo anterior, no dejaremos de advertir las pautas de interacción que he detallado entre la química y la física. De los conceptos de enlace químico que los científicos (no sólo los químicos) consideran indispensables tanto para explicar lo que se ha establecido experimentalmente como para orientar la investigación de lo que queda por descubrir, algunos son conceptualmente incompatibles con la teoría cuántica, y los demás, independientes de ella. Se encuentra una relación semejante en la imbricación de la química y la física en la termodinámica clásica y la termodinámica estadística (Vemulapalli y Byerly, 1999).

El análisis precedente indica que la relación entre la química y la física no puede ser de simple reducción, salvo en un sentido ontológico restringido. Aun así, no es difícil encontrar en la literatura aseveraciones en el sentido de que la química se ha reducido o es reductible a la física, en artículos que muestran escepticismo en cuanto a la generalidad de la reducción. Por ejemplo, Klee (1997) afirma: "Si, por ejemplo, la química es reductible a la física, como en realidad parece serlo, entonces, si hubiéramos

de hacer un inventario ontológico de todas las clases de objetos y propiedades que hay en el mundo, no necesitaríamos enumerar, además de todas las clases físicas de objetos y propiedades (esto es, todas las clases de partículas físicas subatómicas y de sus propiedades subatómicas), objetos y propiedades químicos". Klee no ofrece ningún apoyo para esta aseveración, salvo que la explicación de los fenómenos químicos por la física debe seguirse naturalmente, dada la dependencia ontológica de la química respecto de la física en el sentido de que los objetos y propiedades que figuran en química pueden definirse en física en relación con cantidades.

Derry (1999) escribe: "La química estudia las reacciones entre átomos y moléculas, la formación y el rompimiento de enlaces químicos. Los enlaces están formados por electrones, y están sujetos a las ecuaciones de la física cuántica. Por tanto, la química es reductible a la física". Contrariamente a esta afirmación, los enlaces químicos no están "sujetos" en el sentido de ser "reductibles" a la física cuántica. Así, no podemos concluir que la química se reduzca deductivamente a la física.

Es cierto que las mismas partículas elementales figuran como constituyentes últimos de la materia tanto en la química como en la física, y que los estados de los sistemas químicos están determinados por el comportamiento de estas partículas (sobrevienen a él). Creo que no hay un solo químico que no acepte la idea de que las "partículas" de la física y la química son las mismas, y que la química no necesita ni debe introducir entidades materiales que no estén compuestas de entidades postuladas por los físicos. Sin embargo, esta conciencia por sí sola es insuficiente para explicar los fenómenos químicos, desarrollar teorías químicas con capacidad predictiva o aun para ofrecer modelos de visualización.

Dado el fuerte vínculo ontológico entre la química y la física, y sus débiles lazos epistemológicos, quizá sea ocioso buscar un modelo simple o elegante que describa la relación entre ambas. De hecho, la única pregunta pertinente acaso sea la que planteé antes: ¿cuál es la naturaleza de las leyes y teorías de la física que tan fuerte influencia ejercen en la química y, sin embargo, no pueden subsumir los conceptos y modelos que surgen en los sistemas químicos según esas mismas leyes de la materia?

El uso de la palabra "ley" en la literatura científica es tan ambiguo como vago. Se dice que la termodinámica y la mecánica clásica se basan en un conjunto de leyes fundamentales. Estas leyes difieren mucho en naturaleza de las leyes de las regularidades experimentales observadas; por ejemplo, la ley de Dulong y Petit de la capacidad calorífica de los cristales monoatómicos y la ley de Raoult de la presión de vapor de las soluciones. La mecánica cuántica y la mecánica estadística se identifican como teorías introducidas por medio de postulados que comparten el carácter universal de las leyes de la termodinámica y la mecánica clásica. En general, lo que se llama leyes en ciencia comprende enunciados de regularidades observadas experimentalmente en una clase de sistemas, principios teóricos que rigen tales regularidades y modelos idealizados que las explican. En este sentido incluyente hay muchas leyes tanto en química como en física. Sin embargo, de ellas sólo unas cuantas son fundamentales en el sentido de que subsumen otras leyes u ofrecen racionalizaciones de su validez. En la discusión que

sigue, doy por sentado que las leyes asociadas con la termodinámica, la mecánica estadística, la mecánica cuántica y la mecánica clásica son leyes fundamentales de la física. Estas leyes han venido dando históricamente a la teoría química la forma que tiene en la actualidad. Leyes físicas como las de la relatividad no han desempeñado un papel significativo en la teoría química.

Ya estamos en posibilidad de examinar la respuesta a la pregunta que planteamos antes. Las leyes fundamentales mencionadas imponen restricciones a lo que sucede en la naturaleza. En general, guardan silencio sobre qué posibilidades se presentan efectivamente en la naturaleza, aunque ofrecen las herramientas teóricas para el análisis de los procesos naturales y la predicción de resultados de la medición. No son modelos epistemológicos, sino límites ontológicos. Sólo si aceptamos esta opinión podremos entender cómo han sido eficaces para iniciar nuevos caminos en química al tiempo que han permitido desarrollos independientes de la ciencia a lo largo de sus líneas tradicionales. Un químico que concibe nuevas teorías junto a nuevos experimentos o que simplemente ofrece una explicación de un comportamiento químico observado no puede traspasar las fronteras fijadas por las leyes fundamentales. Dentro de estas fronteras, sin embargo, hay muchas posibilidades no prohibidas por las leyes básicas, pero un solo mecanismo particular se ajusta a los fenómenos químicos específicos que se investigan. Para un químico, el mecanismo por el que se forma un enlace es tan importante como las propiedades generales del enlace. Los químicos deben descubrir este mecanismo conforme ensayan distintas hipótesis en el amplio marco de las leyes físicas. La aplicación de las leyes físicas en nuevas áreas no suele ser una extensión simple, directa, de la teoría física existente.

La teoría cuántica, como se señaló antes, ha sido un éxito al ofrecer una valiosa penetración intelectual en los enlaces químicos. También ha proporcionado una base para la interpretación de las propiedades moleculares. Entre las ideas que forman los fundamentos lógicos de la teoría cuántica se encuentran la dualidad onda-partícula, la interpretación de Born de P y las relaciones de indeterminación y conmutación. Sin embargo, éstas revisten sólo valor periférico para un químico interesado en la aplicación de la teoría cuántica a los enlaces químicos. De hecho, muchos químicos cuánticos practicantes rara vez se adentran en los fundamentos de la teoría cuántica o en cómo se relaciona con ellos la información química. No es posible encontrar soluciones exactas a la ecuación de Schrödinger para moléculas si se usa el hamiltoniano correcto. Así, una extensión directa de la teoría cuántica a la química para obtener autofunciones es impráctica. Además, la falta de simetría de las moléculas imposibilita inferir los valores propios del álgebra de operadores.

La extensión de las leyes cuánticas a la química, como se describió antes, depende del principio variacional. La parte esencial de los cálculos cuánticos en lo que a la química se refiere es el límite inferior que el principio variacional impone a la energía. En vez de intentar inferir los principios del enlace de la teoría cuántica —lo que habría sido ocioso —, los químicos exploraron muchos mecanismos prometedores con la confianza de que sus cálculos no darían un valor de energía inferior al límite fijado por el principio

variacional. Como en ese caso la energía calculada podría encontrarse por encima o por debajo del valor real, que es una incógnita, no habría manera de juzgar el mérito de los modelos teóricos, ni indicación de cómo refinarlos. Han sido el límite inferior de energía fijado por el principio variacional —la frontera ontológica— y los esfuerzos de los químicos para alcanzar esa frontera lo que ha contribuido al desarrollo de la teoría del enlace químico, y no el aparato deductivo de la mecánica cuántica. El que los cálculos quimicocuánticos quizá no alcancen esa frontera con hamiltonianos verdaderos es lo de menos para los químicos. El mayor regalo de la física a la química es la frontera delineada por la primera y no los caminos hacia esa frontera.

Algunos filósofos se han preguntado sobre la distinción entre la ciencia y, digamos, áreas como la astrología y el vudú. Popper llegó a la conclusión de que sólo las teorías científicas son refutables, y en ello radica su autenticidad. Feyerabend defendió la idea anarquista de que no existe para una "disciplina" ninguna posición privilegiada sobre las demás. Mi estudio de la relación entre física y química lleva a una opinión alternativa. Hay una distinción, y procede del hecho de que la ciencia, con base en la teoría y la experimentación, descubre las fronteras ontológicas de la naturaleza. Los científicos que trabajan dentro de estas fronteras adquieren conocimientos profundos sobre la naturaleza, unas veces valiéndose de métodos ortodoxos y otras desviándose de ellos. El vudú y la astrología, en cambio, tienen caprichos en vez de fronteras. La ciencia reconoce y admite un perímetro más allá del cual no podemos razonar; el vudú y la astrología no.

Los aspectos de la relación entre física y química antes descritos no se limitan a la teoría cuántica. Consideremos la segunda ley de la mecánica clásica. Su principal aplicación a la química está en el estudio del transporte (en las fases gaseosa y líquida), mediante el cual los químicos infieren información sobre el tamaño y la forma de las moléculas. La aplicación química de la segunda ley depende del supuesto de que

$$f = ma$$

En el caso ideal de que se estudie una molécula en aislamiento (p. ej., en la teoría cinética de los gases ideales), el signo de igualdad es válido. En todos los demás casos, lo que rige la aplicación de la ley es el signo de desigualdad. Al estudiar la sedimentación y la difusión de macromoléculas en solución, por ejemplo, se supone que la fuerza de la aceleración es mayor que el producto de la masa por la aceleración. Al adaptar la ecuación enunciada a problemas concretos, se añaden términos de fuerzas opuestas del lado derecho. Los parámetros de estos términos casi siempre se obtienen a partir de consideraciones extrateóricas. De lo anterior queda claro que las aplicaciones químicas de la segunda ley dependen de que se trata de una ley limitante, una ley que fija la frontera del comportamiento dinámico permitido.

Este último punto sugiere una interesante analogía entre la química y la ingeniería en su relación con la física. Aunque a menudo se ha planteado la pregunta de si la química se ha reducido o podría reducirse a la física, rara vez oímos un debate sobre la pregunta de si la ingeniería se reduce a la física. Esta falta de curiosidad parece deberse a la tendencia a separar la ciencia y la ingeniería en dos compartimientos distintos. La dependencia del ingeniero respecto de la física se parece mucho a la del químico. En general no se usan las leyes de la física (p. ej., la segunda ley de Newton o la segunda ley de la termodinámica) en ingeniería para predecir el comportamiento de un dispositivo por deducción. Antes bien, las leyes se consideran limitantes, marcos de referencia que permiten optimizar el dispositivo. Aunque los fines de la química y de la ingeniería

difieren mucho, la física desempeña un papel parecido en ambas áreas.

Si bien no existe ningún modelo simple de la compleja relación entre física y química o entre física e ingeniería, a modo de descripción a grandes rasgos podría decirse que la física es como la constitución de un país, una constitución que prohíbe ciertas actividades pero no dicta disposición alguna en cuanto a las actividades permitidas que deben realizarse. La física, en una actitud similar, fija límites. Dentro de esos límites hay una rica variedad de posibilidades, que no pueden inferirse simplemente de las leyes fundamentales.

Whittaker (1951) llama *postulados de impotencia* a las leyes de la física que tienen "carácter permanente y absoluto". Son enunciados negativos en el sentido de que disponen que algo es imposible. Es bien sabido que las leyes de la termodinámica son asertos cualitativos de lo que no puede ocurrir. Whittaker argumenta con éxito que las leyes fundamentales del electromagnetismo, la relatividad y la mecánica cuántica también se basan en enunciados negativos. Luego afirma: "Los postulados ya conocidos de esta clase han demostrado ser tan fecundos en resultados positivos —de hecho, una muy buena parte de la física moderna puede *deducirse* de ellos— que no es irrazonable aguardar expectantes un tiempo en que toda la ciencia pueda *deducirse* de postulados de impotencia por razonamiento silogístico" (las cursivas son mías). Coincido con la opinión de que es el carácter negativo de las leyes de la física lo que les confiere una condición permanente y absoluta. Discrepo, en cambio, de que cualquier ciencia (incluida la física aplicada a los materiales) pueda deducirse de los postulados de impotencia, si por deducción nos referimos al desarrollo de una teoría cuantitativa a partir de las leyes, sin mayores supuestos y sin información experimental. En realidad, un examen cuidadoso de las ramas de la física, por ejemplo, la física del estado sólido, muestra que se ensayan muchas estrategias teóricas dentro del marco de las leyes, y la relación entre ellas y los postulados de impotencia se parece mucho a lo que he documentado sobre el enlace químico.

Esta relación laxamente definida entre las disciplinas química y física —y las dificultades para deducir la primera de la segunda— hace que algunos científicos, tanto físicos como fisicoquímicos, conciban la química como una rama aproximada e imperfecta de la física. En tanto no se desarrolle una teoría rigurosa, opinan, debemos arreglárnoslas con lo que tenemos. No será hasta el advenimiento de mejores computadoras y mejores técnicas matemáticas cuando podamos resolver realmente los problemas de la química. Así se entiende la segunda parte de la declaración de Dirac citada. Me parece una opinión totalmente errónea. Mejores computadoras y mejores técnicas matemáticas permitirían una coincidencia numérica exacta entre experimentos y cálculos, pero en ese mismo proceso se perderán los mecanismos que interpretan los datos y aportan un conocimiento profundo de la naturaleza de los procesos químicos. Considérese el caso de los gases no ideales. Ya tenemos la capacidad informática necesaria para ajustar los datos de presión, volumen y temperatura a cualquier grado de exactitud deseado. Sin embargo, en ese proceso perdemos toda penetración en el comportamiento molecular. La "teoría" resultante es muy inferior a la ecuación

aproximada de Van der Waals, que asocia el comportamiento de los gases al tamaño de las moléculas y las fuerzas que actúan entre ellas. Cabe advertir que esta ecuación, aunque consecuente con las leyes de la física, no se infiere de ellas. El aumento del formalismo no necesariamente conlleva una mejoría del entendimiento; puede incluso impedir el entendimiento y, con él, más investigaciones.

Conclusión

Los conceptos bien establecidos en un área de la ciencia a menudo encuentran aplicaciones naturales en otras áreas de la ciencia. A este respecto, la física cumple una función cardinal. Las investigaciones en física se centran mayormente en sistemas con un pequeño número de variables reales o reducidas y dan lugar a conceptos y leyes fundamentales firmemente establecidos. Es, pues, natural que la química acuda a la física en busca de guía al explorar territorios desconocidos. La principal tesis de este artículo es que las leyes físicas se refieren a limitaciones. Aunque fijan las fronteras en las cuales deben confinarse los mecanismos químicos, no pueden dictar los propios mecanismos. Así, se tiene que ver la química al mismo tiempo como dependiente e independiente de la física. Es probable que la relación entre la física y otras áreas de la investigación científica siga la pauta descrita aquí: dentro de las posibilidades que la física permite, los científicos tienen que buscar explicaciones que dependen de factores externos a la física.

Agradecimiento

Estoy muy agradecido con el profesor Henry C. Byerly. Este artículo debe mucho a su consejo y estímulo.

BIBLIOGRAFÍA

Born, M., *Experiment and Theory in Physics*, Dover Publications, Nueva York, 1956.

Coulson, C. A., *Valence*, Oxford University Press, Nueva York, 1962.

Derry, G. N., *What Science Is and How It Works*, Princeton University Press, Princeton, 1999.

Dirac, P. A. M., "Quantum Mechanics of Many-Electron Systems", *Proceedings of the Royal Society of London*, serie A, vol. 123, Londres, 1929, pp. 714-733.

Feyerabend, P., "Against Method: Outline of an Anarchistic Theory of Knowledge", en M. Radner y S. Winokur (eds.), *Minnesota Studies in the Philosophy of Science*, vol. IV, University of Minnesota Press, Minneapolis, 1970.

Klee, R., *Introduction to the Philosophy of Science*, Oxford University Press, Nueva York, 1997.

Popper, K., *The Logic of Scientific Discovery*, Basic Books, Nueva York, 1959.

Scerri, E. R., "Realism, Reduction and the 'Intermediate Position' ", en N. Bhushan y S. Rosenfeld (eds.), *The Philosophy of Chemistry*, Oxford University Press, Nueva York, 2000.

Schlag, E. W., *Zeke Spectroscopy*, Cambridge University Press, Nueva York, 1998.

Vemulapalli, G. K., y H. Byerly, "Remnants of Reductionism", *Foundations of Chemistry*, vol. 1, núm. 1, 1999, pp. 17-41.

Whittaker, E., *Eddington's Principle in the Philosophy of Science*, Cambridge University Press, Nueva York, 1951.

---

[*] Departamento de Química, Universidad de Arizona, Tucson, AZ 85721, EUA, gkv@u.arizona.edu

QUINTA PARTE

LA TEORÍA QUÍMICA Y LOS PROBLEMAS DE SUS FUNDAMENTOS

XI. ALGUNAS IMPLICACIONES FILOSÓFICAS DE LA SIMETRÍA QUÍMICA

JOSEPH E. EARLEY[*]

Este trabajo trata sobre una noción fundamental de largo desarrollo y lenta difusión, pero de profundas implicaciones filosóficas. La noción es que las propiedades de simetría de un objeto cualquiera no son independientes unas de otras: suelen presentarse reunidas. Se considera que el conjunto de simetrías de un objeto (las que preservan aspectos de su estructura pertinentes al problema en cuestión) constituye un *grupo*. La rama de las matemáticas que se ocupa de tales conjuntos de simetrías se designa *teoría de grupos*.

Los filósofos han discutido la simetría (y la teoría de grupos) a menudo en sistemas abordados por la mecánica cuántica, pero han mostrado menos interés en sistemas considerados sobre todo por los químicos. Este trabajo se ocupa de dos tipos de simetría química, y propone que la *clausura* (el aspecto que distingue a los grupos de otros conjuntos) quizá merezca mayor atención filosófica.

La simetría puede definirse como "inmunidad a un posible cambio" (Rosen, 1995). Si una molécula plana BF_3 (a la izquierda en la figura XI.1) sufriera una rotación de 120° sobre una línea que atravesara el átomo B perpendicularmente al plano de la molécula, ésta adoptaría una configuración indistinguible de la original. La molécula BF_3 es inmune al posible cambio de rotación sobre ese eje "ternario". En cambio, si la molécula $BClF_2$ (a la derecha en la figura XI.1) sufriera una rotación parecida, la configuración de átomos resultante sería muy distinta de la original. Todo enunciado sobre simetría molecular debe incluir la especificación de una operación y de alguna entidad geométrica: rotación y una línea (el eje de simetría) en el ejemplo.

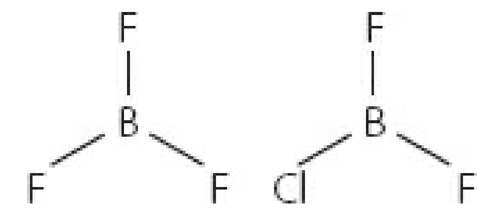


FIGURA XI.1. *Estructura geométrica de dos moléculas planas.*

Como los cuatro átomos se encuentran en el mismo plano en la forma de mínima energía de la molécula BF_3, ésta es también simétrica con respecto a las otras tres rotaciones (una por cada enlace B-F), así como con respecto a un reflejo del plano de la molécula. Estas seis simetrías (en cuanto grupo) especifican buena parte de la estructura de la molécula.[1]

El astrofísico Arthur Eddington hizo una notable declaración: "¿Qué clase de cosa es lo que sé? La respuesta es la *estructura*. Para ser preciso, una estructura del tipo que la teoría matemática de grupos define e investiga" (1939, p. 147).

En otras palabras, se dice que la teoría de grupos en cierto modo abarca todo aquello que Eddington —y presumiblemente todo el mundo— está en posibilidad de conocer. El razonamiento de la teoría de grupos se aplicó por primera vez a la física apenas en los

años que antecedieron a esta declaración; en ese entonces muchos físicos no compartían el entusiasmo de Eddington por este método (véase más adelante). Cada década sucesiva ha visto una expansión de la aplicabilidad del razonamiento de la teoría de grupos. El reciente renacimiento del estructuralismo filosófico (en varias versiones) (French y Ladyman, 2003) puede verse como una expansión más de la apreciación del poder de los métodos de la teoría de grupos. Este capítulo introduce algunos conceptos básicos de la teoría de grupos en la sección "Algunos conceptos de la teoría de grupos"; la sección "Desarrollo de conceptos de la teoría de grupos" da cuenta del origen y la difusión de las ideas de la teoría de grupos; la sección "Sustancias químicas: lo que 'es' podría significar" trata de las sustancias químicas de clase normal, y la sección "Grupos de procesos y redes de reacciones químicas" se refiere a las consecuencias de las simetrías en conjuntos de reacciones químicas.

Formalmente, cualquier *colección* de elementos (de cualquier clase) constituye un *conjunto*. (Supongamos que X_n designa un conjunto de un número n de *elementos* x_i.) Un *grupoide* comprende un conjunto *S (el portador)* y una *operación binaria*, · (algún procedimiento que puede aplicarse a dos elementos del conjunto portador para dar un solo resultado). Si la operación es asociativa, esto es, $a \cdot (b \cdot c) = (a \cdot b) \cdot c$, el grupoide merece la designación de *semigrupo*. Los semigrupos pueden contener o no contener un *elemento identidad*, un elemento único que, al asociarse con un segundo elemento (mediante la operación definitoria de grupos ·), regenera el mismo (segundo) elemento, esto es, $e \cdot a = a = a \cdot e$. El elemento identidad suele designarse 1 (Baumslag y Chandler, 1985).

Los elementos de los conjuntos pueden ser de cualquier clase. Algunos conjuntos tienen *elementos* que son *mapeos* (transformaciones) de otros conjuntos. Una clase de mapeo de interés particular, cuando se aplica a miembros de un conjunto *X*, genera resultados que son *a su vez miembros del mismo conjunto X*. (Éste es un mapeo de *X* sobre sí mismo, a veces llamado *endomapa*.) Si para cierto conjunto *X* existen varios mapeos (endomapas) distintos de esta clase (p, q, r…), *estos mismos mapeos pueden ser elementos de otro conjunto,* M_x: el conjunto de *mapeos del conjunto X sobre sí mismo*. Puede construirse un semigrupo en el conjunto M_x usando la *composición de mapeos* como operación definitoria de semigrupos, · . Esto es, $p \cdot q$ corresponde al mapeo compuesto obtenido aplicando primero el mapeo *p* a un miembro de *X* (lo que genera otro miembro de *X*) y luego el mapeo *q*, de tal manera que $x_{(p \cdot q)} = (x_p)_q$. Como cada uno de los mapeos iniciales, al aplicarse a cualquier miembro de *X*, genera otro miembro de *X*, todos los compuestos de tales mapeos también generan miembros de *X*. La existencia general de tales conjuntos de endomapeos se establece en el *teorema de Cayley*: para cualquier semigrupo *S* existe un mapeo de *S* sobre M_x con correlación de los elementos uno a uno, para algún *X* apropiado. Este tipo de endomapa de semigrupo opera con arreglo a una importante clase de *clausura*.

Un *grupo* es un semigrupo que tiene un elemento identidad y para el cual cada elemento tiene *un inverso*: un elemento del grupo que da el elemento identidad cuando se asocia con el elemento dado, esto es, $a \cdot b = 1 = b \cdot a$. (El inverso del elemento *a* es a^{-1}.) En suma, un *grupo* consiste en un conjunto de elementos y una operación binaria tal que: *i*) la aplicación de la operación es asociativa, *ii*) existe un elemento identidad y *iii*) todo elemento tiene un inverso. Los grupos pueden contener *subgrupos*, reuniones más pequeñas de elementos que en sí mismas cumplen los criterios para ser un grupo.

Un conjunto, S_x, de puros *mapeos uno a uno de X sobre sí mismo* se llama *grupo simétrico de X*. La aplicación de la operación definitoria (composición de mapeos) a cualquier par de elementos del grupo (mapeos de *X* sobre *X*) *genera un miembro del grupo*, esto es, $a \cdot b = c$. Tanto *a* como *b* son elementos del grupo, y *c* también lo es (todos ellos son mapeos). Es decir, los grupos simétricos tienen la propiedad de *clausura*.

Las clausuras de clases relacionadas abundan en la naturaleza. (Un tema principal de este trabajo es que el logro de la clausura merece mayor atención filosófica.) Los miembros de los grupos simétricos son las posibles *permutaciones* (redisposiciones) de los elementos del conjunto en que se basa el grupo. El teorema de Cayley muestra que todo grupo tiene la misma estructura que un grupo de permutaciones (es *isomorfo* a él). Esto es, todo grupo es isomorfo a un subgrupo del grupo simétrico que se basa en algún conjunto apropiado.

Conviene ilustrar más lo que se entiende por *clausura*. Si *n* es el *número de miembros* de cierto conjunto *X*, entonces hay *n! (n* factorial: $n \times n - 1 \times n - 2 \times \ldots 1$) *elementos* del grupo simétrico correspondiente S_n. (Estas variaciones *n!* son las *permutaciones* de *X*.) Si hay *tres* miembros de *X* (1, 2, 3, digamos), hay *seis* permutaciones de *X*:

$$i = 1\ 2\ 3,\ \sigma_1 = 2\ 3\ 1,\ \sigma_2 = 3\ 1\ 2,\ \tau_1 = 1\ 3\ 2,\ \tau_2 = 3\ 2\ 1,\ \text{y}\ \tau_3 = 2\ 1\ 3$$

Hay entonces seis (sólo seis) miembros equivalentes del grupo S_3: los seis *mapeos* que dan cada una de las seis permutaciones desde la configuración inicial, 1 2 3.

Considérense, por ejemplo, las moléculas del tipo de BF_3. Para un triángulo equilátero plano de vértices designados 1, 2 y 3 (figura XI.2), una rotación de 120° sobre el eje ternario (la línea perpendicular al plano del triángulo que lo atraviesa por el centro) corresponde a σ_1. Una rotación de 240° sobre el mismo eje corresponde a σ_2. Los mapeos τ_1, τ_2 y τ_3 corresponden a rotaciones de 180° sobre cada uno de los tres ejes dobles que conectan los vértices y el centro del triángulo. La aplicación sucesiva de cualquier número de estos mapeos (la operación definitoria del grupo) a cualquier permutación de *X* genera otra permutación del conjunto *X*. El elemento identidad *i* (dejémoslo a un lado) existe. Cada elemento *Z* tiene un *inverso* *Y* tal que $Z \cdot Y = 1$. (Sobre esta base, S_3 es un grupo, no un semigrupo.)

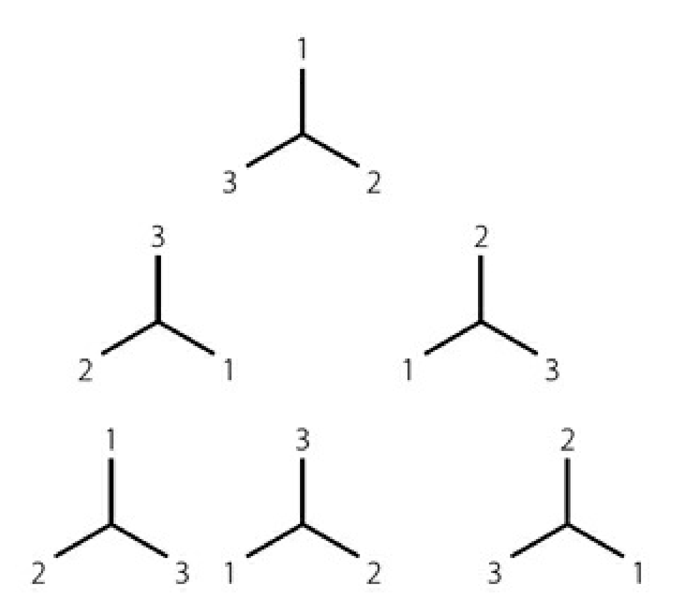


FIGURA XI.2. *Posibles permutaciones de una estructura plana con simetría ternaria.*

Resulta que hay sólo seis maneras distintas de que una molécula (u otra clase de objeto) ejemplifique el grupo S_3: hay sólo seis "realizaciones" del grupo. En todos los casos, son varias las maneras en que un grupo determinado puede realizarse. En la mayoría de los grupos este número es muy grande. Tales realizaciones suelen agruparse en tipos (como las dos representaciones σ y tres τ en S_3.) El grupo S_3 y sus propiedades son pertinentes a todas las moléculas trigonales planas, y también a *cualquier cuestión* en la que interactúan tres entidades *totalmente equivalentes*. El grupo abstracto S_3 atañe a una extensa variedad de problemas: este grupo resume las condiciones que deben cumplirse en cualquier situación a la que se aplica.

Desarrollo de conceptos de la teoría de grupos (según Wussing, 1984)

Los artistas tradicionales de muchas culturas estaban bastante familiarizados con las simetrías espaciales, y exploraron el amplio (pero limitado) abanico de posibles disposiciones geométricas bidimensionales de los objetos. Los matemáticos del mundo antiguo llevaron el razonamiento geométrico formal a un alto grado de desarrollo, sobre todo en las regiones de lengua griega. Radicales adelantos matemáticos a fines del siglo XVIII dieron lugar a varios tipos de geometría abstracta. Aunque la teoría de grupos hoy está considerada como el estudio de la simetría, los primeros pasos que en la actualidad asociamos con este enfoque no procedieron de la geometría. Las nociones iniciales fueron producto de las investigaciones de J.-L. Lagrange (1736-1813) y otros matemáticos sobre por qué ciertas técnicas relativas a la extracción de raíces (métodos de radicación) que eran eficaces para resolver ecuaciones algebraicas de tercero y cuarto grados no servían para las de mayor grado. En 1799 P. Ruffini (1765-1822) publicó una demostración de que *no* era posible resolver ecuaciones de quinto grado por métodos de radicación. Usó un procedimiento que implicaba cambios sistemáticos (permutaciones) y recurrió explícitamente a una propiedad de clausura. A.-L. Cauchy (1789-1857) y N. H. Abel (1802-1829) ampliaron y sistematizaron las nociones de Ruffini. A principios del siglo XIX se reconoció que estos resultados tenían relación con la obra de L. Euler (1707-1783), C. F. Gauss (1777-1855) y L. Kronecker (1823-1891) sobre las permutaciones como parte de la teoría de números.

Un importante adelanto (defendiblemente, el *descubrimiento* de la teoría de grupos) fue conseguido en 1832 por E. Galois (1811-1832), quien acometió el problema de la resolubilidad de ecuaciones empleando un razonamiento que hoy se consideraría de un tipo expresamente análogo al de la teoría de grupos. Se considera a Galois el primero en haber entendido que la solución algebraica de una ecuación guarda relación con un grupo de permutaciones asociado a la ecuación. Sin embargo, la obra de Galois era tan concisa que resultaba casi ininteligible. En 1852 E. Betti (1823-1892), con base en la edición de Liouville de 1846 de la obra de Galois, aplicó conceptos de la teoría de permutación de grupos a la solución de ecuaciones algebraicas. Comentarios de C. Jordan (1838-1922) en 1865, 1869 y 1870 hacen pensar que los matemáticos empezaban a apreciar la enorme importancia de los métodos de la teoría de grupos. La obra de J.-A. Serrat (1819-1885) indica que en 1866 la teoría de permutación de grupos ya era un área de investigación independiente. A. J. Cayley (1821-1895) vinculó la teoría de permutación de grupos con los estudios de geometría. En 1872 F. Klein (1849-1925) inició su "programa de Erlangen" para aplicar la noción de *grupo de transformación* a una extensa gama de problemas de "las geometrías". A principios del siglo XX matemáticos y físicos, sobre todo en Gotinga, aplicaban estos métodos a una diversidad de problemas científicos. En 1920 la teoría de grupos había alcanzado su forma madura.[2]

En 1926 E. Wigner (1902-1995) publicó un artículo en el *Zeitschrift für Physik*, en el que mostraba que los métodos de la teoría de grupos eran aplicables a ciertos problemas

mecánico cuánticos, específicamente al entendimiento de los espectros de los átomos polielectrónicos. Amplió el artículo en un libro que se publicó en alemán en 1931. En 1927 H. Weyl señaló que, si bien la formulación de la mecánica cuántica en relación con el espacio de Hilbert (debida a J. von Neumann [1903-1957]) aclaraba cómo se podían deducir enunciados físicos de operadores (autoadjuntos) correspondientes a observables físicos, la cuestión más profunda de cómo se llega a tales operadores no podía abordarse adecuadamente más que con la teoría de grupos.

En el prefacio a la edición en inglés de 1959 de este libro, Wigner escribió: "Cuando en 1931 se publicó por primera vez la versión original en alemán, había gran renuencia entre los físicos a aceptar los argumentos y el punto de vista de la teoría de grupos. Complace al autor que esa renuencia prácticamente haya desaparecido de entonces a esta parte, y que, de hecho, la generación más joven no entienda cuáles eran sus motivos ni su fundamento" (Wigner, 1959, p. v). (La generalizante declaración de Eddington citada al principio de este trabajo se publicó en 1939.) En los años cuarenta y cincuenta del siglo XX los fisicoquímicos usaron la teoría de grupos para estudiar las estructuras del estado sólido y los espectros vibracionales (infrarrojos y de Raman). En 1958 F. Basolo y R. Pearson mostraron cómo un método basado en el razonamiento de la teoría de grupos (la teoría del campo cristalino) racionalizaba los colores, las propiedades magnéticas y los mecanismos de reacción de los complejos inorgánicos. El pequeño libro introductorio de Cotton de 1963 *Chemical Applications of Group Theory* completó la naturalización de los métodos de la teoría de grupos en los dominios de los químicos. En 1965 Jaffe y Orchin publicaron *Symmetry in Chemistry*, con lo que llevaron a un amplio público de químicos la aplicación de la teoría de grupos a la espectroscopia de compuestos orgánicos.

P. C. Suppes (1988) empleó explícitamente conceptos de la teoría de grupos en su discusión filosófica de los modelos en la ciencia. Tomó las teorías consideradas como preexistentes, y también dio por sentado que los elementos de cada una de ellas constituyen un conjunto *cerrado* (correspondiente a un grupo matemático). Consideró que dos o más modelos (usados en teorías científicas) son *isomorfos* si corresponden al mismo grupo matemático. Van Fraassen (1989) analizó varios tipos de argumentos que implicaban simetría, principalmente para ayudar a científicos y filósofos a resistirse "al canto de sirenas de las probabilidades empíricas determinadas *a priori* sobre la base de puras consideraciones de simetría". Al igual que Suppes, da por cierto, de vez en cuando, que la clausura de elementos es un aspecto generalizado de entidades y teorías que se afrontan en la ciencia, pero no da explicación alguna del fundamento de esos tipos de clausura.

La pregunta de cómo sería posible que una agrupación de partes llegara a constituir un todo coherente —cómo podría obtenerse la clausura— se analiza de manera indirecta en Rescher (1973) y en Van Fraassen (1991). Ninguno de los dos autores da una base adecuada a supuestos como los que están implícitos en el estudio de Suppes de las teorías científicas. Algunas discusiones recientes de la emergencia (p. ej., Klee, 1984; Newman, 1996; Humphreys, 1997; Wilson, 1999; Kronz y Tiehen, 2002) no plantean de

manera expresa la importante cuestión de que la *clausura* de redes de relaciones (o bien en el espacio, o bien en el tiempo) tiene consecuencias significativas. Silberstein y McGeever (1999) distinguen entre *emergencia ontológica* —"características de sistemas o totalidades que poseen capacidades causales intrínsecas no reductibles a ninguna de las capacidades causales de las partes ni a ninguna de las relaciones (reductibles) entre las partes"— y *emergencia epistemológica*. Esta última es "un mero artificio de un modelo o formalismo específico generado por análisis macroscópico, descripción funcional o explicación". Ese artículo no menciona la importante diferencia entre reuniones de partes que participan en una clausura de relaciones que corresponden a un grupo matemático, y agregados de fragmentos que no presentan tal clausura; éste es el "punto de vista de la teoría de grupos" mencionado por Wigner.

Existe un creciente interés en el estructuralismo filosófico (p. ej., French y Ladyman, 2003). El realismo estructural epistémico sostiene (con Eddington) que nuestro conocimiento de la naturaleza está restringido a sus aspectos estructurales. El realismo estructural óntico adopta la postura más radical de que no existe otra cosa que estructura (y propone el lema "relaciones sin *relata*"). Van Fraassen (1999 y próxima publicación) señaló problemas serios de cada uno de estos métodos y ha propuesto un esquema conceptual alternativo pero relacionado. Todas estas discusiones se han focalizado principalmente en la mecánica cuántica. Este trabajo considera algunas aplicaciones *químicas* de lo que Wigner llamó "el punto de vista de la teoría de grupos".

Muchas especies químicas son miembros de conjuntos de *isómeros*: dos o más sustancias químicas que tienen exactamente los mismos constituyentes atómicos, pero que difieren en sus propiedades. Aunque el número y la identidad de átomos constitutivos son los mismos en todos los miembros de un conjunto de isómeros, los diversos miembros de tales conjuntos suelen tener efectos muy diversos —por ejemplo, sobre organismos biológicos—: en ciertos casos un isómero es terapéutico mientras que otro es bastante tóxico. Tal divergencia de comportamiento procede de diferencias de simetría de las unidades (a menudo moléculas) que constituyen esas sustancias. Queda claro que el enfoque formal de la simetría —la teoría de grupos— es muy pertinente a la química. Ese punto de vista es de especial utilidad en el estudio de interrelaciones entre las propiedades de unidades compuestas (p. ej., moléculas) y las características de los componentes (p. ej., átomos) de los cuales están hechas esas entidades compuestas.

El término "mereología" (acuñado por S. Leśniewski [1886-1939]) a veces "se usa de manera general para referirse a cualquier teoría formal de conceptos de parte-todo y conceptos asociados". Martin (1922) sostenía que la mereología convencional no aborda adecuadamente la combinación química. Puede ser que quienes se especializan en mereología aún no hayan adoptado el punto de vista de la teoría de grupos. El libro de Lewis (1990) sobre la lógica de la teoría de conjuntos no se ocupa de los conceptos de grupos. Simons (1987) considera las totalidades integradas —la clase de coherencia que ejemplifican las moléculas y otras entidades químicas—, pero sólo en un breve capítulo final basado principalmente en un artículo anterior de Rescher y Oppenheim (1955), derivado a su vez de la discusión que C. von Ehrenfels hiciera en 1890 del concepto de la *Gestalt*.

Un "todo mereológico" es un individuo compuesto de partes que a su vez son individuos (Simons, 1987). Cualesquiera dos (o más) individuos pueden constituir un todo mereológico; por ejemplo, la estrella Sirio y el zapato izquierdo de usted. En relación con agregados tan libres, parece válida la "doctrina del gratuito ontológico" *(ontological free lunch*) de D. M. Armstrong:

> […] cualquier cosa que sobreviene, o […] se implica o necesita, […] no es algo ontológicamente adicional a las entidades que sobrevienen o que necesitan. Lo que sobreviene no es una adición de ser […] Los todos mereológicos no son ontológicamente adicionales a todas sus partes, ni las partes son ontológicamente adicionales al todo que constituyen. Esto trae por consecuencia que los todos mereológicos sean idénticos a todas sus partes tomadas en conjunto. La superveniencia simétrica da identidad [1997].

Este principio puede aplicarse cuando las interacciones detalladas entre los componentes de un agregado son insignificantemente pequeñas: en definitiva, no se aplica a la mayoría de las combinaciones químicas. N. Goodman (1951 [1977]) examina cómo varios métodos de especificación de los individuos que han de usarse en un modo de discurso generan diversos "sistemas". Implica que —sin importar cuál sea el sistema

—, una vez que se han identificado ciertos individuos, esa identificación también es válida cuando dichos individuos se incluyen como partes en algún todo. En la combinación química éste no es el caso: las entidades químicas en combinación no son precisamente las mismas entidades que no están en combinación. Por ejemplo, todos los hidrocarburos están compuestos (en cierto sentido) de átomos de carbono y de hidrógeno, pero la espectroscopia por resonancia magnética nuclear muestra claramente que aun en hidrocarburos relativamente pequeños hay muchos tipos distintos de átomos de hidrógeno y varias clases de átomos de carbono. Cada uno de estos tipos y clases presenta propiedades diferentes. La posición específica que una entidad química dada (átomo, ión, etc.) ocupa en una molécula u otro agregado influye en las propiedades particulares de dicha entidad dada, y también contribuye a las características de la molécula como un todo. En general, las propiedades de los componentes químicos resultan seriamente afectadas por el hecho de que se encuentren en combinación (Earley, 2005). La combinación química no está bien entendida en relación con la adición vectorial de propiedades de los componentes. En lo que respecta a la combinación química, no hay "gratuito ontológico" *(ontological free lunch*), contra la opinión de Armstrong.

Las moléculas (al igual que los iones moleculares y las entidades químicas relacionadas pero más complejas) están compuestas de números bastante pequeños de componentes que tienen interrelaciones de sólo unos cuantos tipos. Los electrones, y los núcleos de una clase particular, son indistinguibles unos de otros (en aislamiento). Todos los componentes de entidades químicas participan en un movimiento térmico continuo. Los valores de todos los parámetros estructurales (longitudes y ángulos de enlace) de cada entidad molecular oscilan de manera incesante. La estructura geométrica de cada entidad molecular química está lejos de una disposición rígida de los átomos en el espacio. Las especies químicas estables son aquellas que persisten en una pauta específica de movimiento vibratorio interno tal que las distancias y los ángulos medios están razonablemente bien definidos. (Las variedades de vibración interna que no se ajustan a esa pauta tienden a desaparecer.) La identidad de los individuos químicos no depende de una sola estructura estática y fija, sino más bien del hecho de un continuo retorno a disposiciones anteriores de las partes (Earley, 2003c). Esta recurrencia indefinidamente repetida es efecto (y marca distintiva) de la clausura que establece la reunión de simetrías espaciales de ese individuo químico en cuanto grupo, y no alguna otra clase de conjunto. Toda entidad química, en la medida en que persiste en el tiempo, ejemplifica alguna estructura de la teoría de grupos, correspondiente a la reunión de propiedades de simetría espacial de la disposición media de las partes que persiste a lo largo del movimiento térmico. En virtud de la clausura de relaciones que fundamenta la estabilidad dinámica de tales estructuras espaciales, las moléculas pueden actuar como unidades en interacciones con el resto del mundo (Earley, 1998a; 1999).

Heelan (2003) refiere que el joven E. Husserl (1859-1938), cuando estaba recién integrado al cuerpo docente de la facultad de filosofía de la Universidad de Gotinga, quedó profundamente impresionado por el trabajo de aplicaciones de la teoría de grupos

que realizaban sus colegas matemáticos y físicos de la facultad (incluidos D. Hilbert y F. Klein). Según Heelan, Husserl llegó a sostener que la identificación humana de cualquier objeto como individuo concreto no está garantizada sino cuando la influencia de una región espacial específica sobre el observador permanece consecuente bajo el conjunto de transformaciones correspondientes a la simetría del espacio tridimensional.[4] Es decir, la identificación de cualquier objeto en cuanto individuo se basa en el reconocimiento, por algún copartícipe de la interacción, de que el objeto realiza algún grupo. En los casos favorables, el grupo de simetrías que explica la estabilidad de esa unidad en el tiempo puede ser el mismo grupo implicado en el reconocimiento de la individualidad.

En una discusión contemporánea del significado del concepto de "sustancia", Ruth Millikan (2000) sostiene: "Las sustancias […] son cualquier cosa que se pueda aprender de uno solo o unos cuantos encuentros dados, varias aptitudes o información que se aplique a otros encuentros […] Además, esta posibilidad debe estar fundada en alguna clase de necesidad natural […] La función de un concepto de sustancia es posibilitar esta clase de aprendizaje y uso del conocimiento respecto de una sustancia específica". Sobre esta base, Millikan mantiene que objetos físicos, individuos históricos, materiales, clases naturales, sinfonías, historias familiares y muchas otras clases de cosas merecen todas la designación de "sustancia". La manera en que muchas formas verbales correspondientes a "ser" se usan en las más antiguas fuentes indoeuropeas (en griego, la poesía épica de Homero, y en sánscrito, los Vedas) hace pensar que la *persistencia* (p. ej., vivir) era el significado característico original de "ser" (Kahn, 1973). Esto indica que la *estabilidad en el tiempo* debería tomarse como noción ontológica central. El concepto de sustancia de Millikan comprende la noción de persistencia, característica de las antiguas fuentes indoeuropeas, y agrega la noción de interacción con algún individuo capaz de aprender. Este último aspecto parece estar en contacto con la interpretación de Heelan, desde la perspectiva de la teoría de grupos, de la doctrina de Husserl.

Los criterios de sustancialidad propuestos tanto por Millikan como por Husserl parecen requerir la interacción con individuos que son capaces de aprender. Esto es consecuente con los intereses humanísticos de esos filósofos, pero la idea principal que proponen no parece requerir un observador sensible, o siquiera depender de la naturaleza particular del copartícipe de interacción de la sustancia putativa. En otro trabajo argumenté que siempre que una reunión de individuos (de cualquier clase) alcanza suficiente coherencia para que la reunión, en cuanto unidad, tenga influencia causal de cualquier clase, entonces puede considerarse que ese agregado ha alcanzado condición ontológica, por lo menos con respecto a esa interacción causal (Earley, 2003b). Sobre esta base, la existencia de sustancias químicas (y su interacción con el resto del mundo, incluidos sus propios componentes) puede verse como dependiente de la *clausura* de conjuntos de relaciones que implican los componentes de esas sustancias, clausura que corresponde a la transmutación de ese conjunto en un grupo que es característico de cada sustancia en cuanto tal.

Las simetrías que implican las entidades químicas moleculares consideradas en la sección anterior eran espaciales, al igual que las mencionadas en la introducción. Sin embargo, la química se ocupa principalmente de los cambios de algunas sustancias químicas en otras; esto es, la química estudia procesos prolongados en el tiempo. Las simetrías *temporales* son de importancia decisiva para la química de reacciones.

Cuando varias especies químicas interactúan en algún medio (una solución acuosa, un gas difuso, magma volcánico), pueden producirse miríadas de reacciones, cada una a mayor o menor velocidad. Muchas de estas reacciones, por lo general la mayoría, se agotan con bastante rapidez, al consumirse algunos reactivos necesarios. Sin embargo, es posible que se produzca algún conjunto de reacciones para regenerar todos los componentes necesarios, de manera que el conjunto de reacciones sigue funcionando una vez que otras reacciones han cesado. Hay buenas razones para sostener que tal clausura de sistemas de reacciones se vuelve más probable conforme aumenta el número de especies químicas participantes. En un agregado de reactivos químicos suficientemente complejo, la existencia de una o más de tales redes de reacciones cíclicas resulta sumamente probable (Kauffman, 1993; Earley, 1998b).

La estabilidad (u oscilación regular) aproximada que surge de muchas reacciones químicas en proceso indica que se ha producido la *clausura* de una red de procesos dinámicos.[5] (Todo organismo biológico debe su vida a muchas redes coherentes de procesos que operan en diversas escalas de tiempo; muchas son internas del organismo y otras externas a él.) Cuando una red de reacciones de un sistema químico abierto da origen repetidamente a la misma secuencia aproximada de estados —como cuando una llama arde lentamente en un mechero de Bunsen—, parece que se satisfacen los criterios de sustancialidad de Millikan y Husserl, de manera que la coherencia alcanza condición ontológica[6] como clase alternativa de sustancia química. Sobre esta base, cierta llama de mechero de Bunsen podría reunir los requisitos de "sustancia" (en el sentido de Millikan y Husserl) más allá de las moléculas de hidrocarburo y oxígeno que la alimentan y de las moléculas de agua y bióxido de carbono que son su producto. (Aprender a reconocer una llama como tal es útil para los animales jóvenes.)

En cada uno de tales casos de coherencia surgida de un conjunto de reacciones químicas, un conjunto (por lo común bastante grande) de ecuaciones de reacciones estequiométricas, como la ecuación (1), vinculan el estado del sistema en un momento anterior con el estado del sistema en un momento posterior.

$$aA + bB + \cdots \rightarrow pP + qQ + \cdots \qquad (1)$$

Aquí, A, B…, P, Q…, se refieren a moléculas o iones, o bien a concentraciones (actividades)[7] de tales entidades, y a, b…, p, q…, son "coeficientes estequiométricos" que garantizan que los productos de la reacción contienen el mismo número total de cada clase de átomo que los reactivos. Un conjunto de ecuaciones estequiométricas como la

ecuación (1), complementado con las ecuaciones cinéticas apropiadas, “las leyes de velocidad de reacción completas”,[8] constituiría un mapeo del paso de un estado anterior del sistema a uno posterior.[9]

Con frecuencia, las concentraciones químicas aumentan o disminuyen de manera monótona hasta que se alcanza una condición de equilibrio químico. Esto es, el punto del espacio de concentración[10] que describe el sistema se mueve hacia un único punto que corresponde a la condición de equilibrio. Si el estado que correspondería al equilibrio químico resultara inestable, las concentraciones de especies químicas podrían sufrir oscilaciones en torno a ese estado.[11] Los sistemas que implican dos reactivos significativos (de referencia),[12] y sólo dan lugar a reacciones bimoleculares y unimoleculares, siempre tienen estados de equilibrio estable.[13] Los sistemas que constan de tres reactivos pueden tener o no tener estados de equilibrio estable. M. Eiswirth *et al*. (1991) sostienen que todos los mecanismos complejos pueden reducirse a procesos de dos o tres reactivos.

King (1980) examinó estructuras de sistemas de reacciones químicas en las que intervenían tres reactivos de referencia. Cada reactivo puede influir en la velocidad de reacción (aumentarla o disminuirla) de cualquiera de los otros dos reactivos o de ambos, o, asimismo, no influir en uno o en ninguno de ellos. Resulta posible demostrar que en el caso de tres reactivos hay 729 pautas distinguibles de tales influencias. Este número puede dividirse en 16 familias (de desigual número de miembros) de pautas de influencia similares. Se puede mostrar que, para generar una oscilación química, cada uno de los tres reactivos de referencia debe influir en todos los demás directa o indirectamente. Sólo cinco de las 16 familias (incluido un total de 416 pautas distintas de influencias recíprocas) satisfacen ese requisito. Una familia de redes de influencias que puede sostener oscilaciones contiene 16 pautas distintas, dos de las cuales se muestran en la figura XI.3.

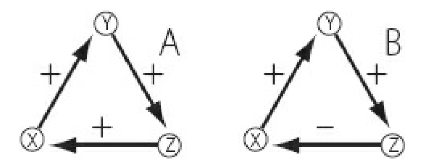


FIGURA XI.3. *Diagramas de influencias de dos redes de reacciones en las que intervienen tres reactivos, X, Y y Z. Las flechas indican la dirección de la influencia; el signo positivo corresponde a la activación; el negativo a la inhibición. En el diagrama A, X activa a Y, Y activa a Z y Z activa a X. En el diagrama B, X activa a Y y Y activa a Z, pero Z inhibe a X. (Según King, 1980.)*

King usó la teoría de circuitos conmutados para explorar la dinámica del movimiento en torno del punto del espacio de concentración que corresponde (o correspondería) al equilibrio químico de cada una de las pautas de la figura XI.3. Se considera que cada concentración tiene (sólo) dos condiciones posibles: alta (1) o baja (0). Sobre esta base, hay ocho estados generales posibles del sistema de tres reactivos. Se pueden representar esos estados de modo que ocupen los vértices de un cubo (figura XI.4). Las flechas que

corren por las aristas del cubo muestran el estado que sucedería a cada uno de esos estados tras cada incremento de tiempo. (Una flecha del estado 101 hacia el estado 100 indica que si un sistema comienza o llega a estar en una condición de altas concentraciones de X y Z, y baja concentración de Y [110], entonces en el siguiente periodo cambiará a un estado de alta concentración de X pero bajas concentraciones de Y y Z [100].)

La figura XI.4 (A) (correspondiente a la figura XI.3 [A]) indica que, sea cual fuere la condición inicial, el sistema acaba por situarse en uno de los estados constantes de no equilibrio (000 o 111); esto es, la red de reacciones correspondiente a los diagramas A de ambas figuras es *biestable*. La figura XI.4 (B), correspondiente a la figura XI.3 (B), también tiene dos estados constantes especiales de no equilibrio (101 y 010), pero cualquier sistema que comienza en uno de estos estados lo abandona, y ningún sistema llega a ninguno de esos estados desde ninguno otro: ambos estados son *inestables*. Un sistema que comienza en cualquiera de esos estados se mueve de inmediato al ciclo de seis miembros (000, 100, 110, 111, 011, 001), que corresponde a una oscilación en torno del estado inestable (de equilibrio virtual) representado por el centro del cubo. Sin importar cómo empiece el sistema, termina por alcanzar esa serie cerrada y permanece en esa misma secuencia de estados de manera indefinida (Earley, 2003a). (Esa serie describe un *ciclo límite*.) Si consideramos las concentraciones de cada uno de los tres reactivos de referencia pertinentes (X, Y, Z) como miembros de un conjunto de base, y las reacciones químicas resumidas en el diagrama de influencias como las operaciones de mapeo apropiadas, la existencia del ciclo cerrado de estados indica que la reunión de simetrías (temporales) característica de este agregado de reacciones químicas constituye un grupo y no un conjunto de alguna otra clase. Una vez que un sistema real correspondiente a este modelo simplificado alcanzara el ciclo cerrado de estados, al parecer se cumplirían los criterios de sustancialidad (de partícipes de interacción apropiadamente constituidos) propuestos por Millikan y Husserl: se produciría una emergencia ontológica.

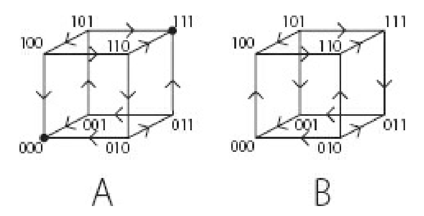


FIGURA XI.4. *Diagramas de conmutación correspondientes a los dos diagramas de influencias de la figura XI.3. Los vértices de cada cubo corresponden a estados instantáneos del sistema de reacción, donde las concentraciones de X, Y y Z son altas (1) o bajas (0). (En el estado 000 las tres concentraciones son bajas; en el estado 010 las concentraciones de X y Z son bajas y la de Y es alta.) Las flechas situadas en las aristas del cubo indican la dirección del cambio en el siguiente incremento de tiempo predicho por el diagrama de influencias. Los estados en los que confluyen tres flechas son estables (sumideros); los estados de los que parten tres flechas son inestables (fuentes). En el diagrama B, una serie de seis flechas consecutivas corresponde a una oscilación de ciclo límite en torno de un estado inestable (equilibrio virtual) representado por el centro del cubo. Esa serie*

es un "atractor". Una serie cíclica correspondiente de seis miembros en A es inestable (un repulsor). (Según King, 1980.)

El análisis de King de este ejemplo de tres reactivos muestra claramente que las propiedades de simetría de las redes de reacciones químicas ofrecen la base para entender lo que debe ocurrir para que tales sistemas generen una secuencia cerrada de estados, por lo que también ofrecen la base de la interacción coherente necesaria para cumplir las condiciones de sustancia en el sentido de Millikan (y Husserl).

Este punto de vista sería consecuente con lo que podría llamarse *realismo estructural óntico moderado* (MOSR, por sus siglas en inglés). A falta de la clausura de la red de relaciones que dan origen a una persistencia a largo plazo, el conjunto de reacciones no tendría suficiente integridad para garantizar su identificación como agente efectivo con respecto a algunos copartícipes de interacción (sensibles o no sensibles). En ese sentido, la existencia de la coherencia depende totalmente de la estructura (de la teoría de grupos), como sostienen Eddington y los realistas estructurales posteriores. No obstante, tampoco ocurriría tal clausura sin las entidades (de menor nivel) (A, B, etc.) que intervienen en las reacciones de componentes. También es indispensable un sustrato material apropiado (A, B, etc.), pero pueden resultar coherencias isomórficas incluso de sustratos muy variados. (Varias especies químicas distintas podrían funcionar como A, por ejemplo.)

La consideración de sustancias químicas moleculares y redes coherentes de reacciones químicas en sistemas abiertos no plantea los sutiles problemas que parecen ser específicos de la mecánica cuántica. Sin embargo, el examen de esos sistemas químicos sí indica que probablemente una atención *filosófica* más completa a la importancia decisiva de la *clausura* de relaciones entre los componentes de individuos compuestos (esto es, una apreciación más cabal del descubrimiento de la teoría de grupos logrado por Galois hace dos siglos) ayudaría a resolver algunos problemas filosóficos actuales, específicamente los relacionados con la emergencia.

BIBLIOGRAFÍA

Armstrong, D. M., *A World of States of Affairs*, Cambridge University Press, Cambridge, 1997, p. 12.

Baumslag, B., y B. Chandler, *Schuam's Outline of Group Theory*, McGraw-Hill, Nueva York, 1985.

Basolo, F., y R. Pearson, *Mechanisms of Inorganic Reactions: A Study of Metal Complexes in Solution*, Wiley, Nueva York, 1958.

Cotton, F. A., *Chemical Applications of Group Theory*, Wiley, Nueva York, 1963.

Earley, Sr., J. E., "Modes of Chemical Becoming", *Hyle*, vol. 4, núm. 2, 1998(a), pp. 105-115.

———, "Naturalism, Theism, and the Origin of Life", *Process Studies*, vol. 27, núm. 3-4, 1998(b), pp. 267-269.

———, "Varieties of Chemical Closure", en J. Chandler y G. van de Vijver (eds.), *Closure*: *Emergent Organizations and their Dynamics. Annals of the New York Academy of Science*, New York Academy of Science, Nueva York, vol. 191, 1999, pp. 122-131.

———, "Constraints on the Origin of Coherence in Far-From-Equilibrium Chemical Systems", en T. Eastman *et al*. (eds.), *Physics and Process Philosophy*, SUNY Press, Albany, Nueva York, 2003(a), pp. 63-73.

———, "How Dynamic Aggregates May Achieve Effective Integration", *Advances in Complex Systems*, vol. 6, núm. 1, 2003(b), pp. 115-126.

———, "On the Relevance of Repetition, Recurrence, and Reiteration", en D. Sobczynska, E. Zielonaka-Lis y P. Kreidler (eds.), *Chemistry in the Philosophical Melting Pot*, Peter Lang, Fráncfort, 2003(c), pp. 171-185.

———, "Why There is No Salt in the Sea", *Foundations of Chemistry*, vol. 7, núm. 1, 2005, pp. 85-102.

Eddington, A., *The Philosophy of Physical Science*, MacMillan, Nueva York, 1939.

French, S., y J. Ladyman, "Remodeling Structural Realism: Quantum Physics and the Metaphysics of Structure", *Synthese*, vol. 136, núm. 1, 2003, pp. 31-56.

Goodman, N., *The Structure of Appearance*, Reidel, Dordrecht, Boston, 1951 (3ª ed., 1977).

Heelan, P., "Paradoxes of Measurement", en J. Earley (ed.), *Chemical Explanation: Characteristics, Development, Autonomy. Annals of the New York Academy of Sciences*, New York Academy of Sciences, Nueva York, vol. 988, núm. 1, 2003, pp. 114-127.

Humphreys, P., "How Properties Emerge", *Philosophy of Science*, vol. 64, núm. 1, 1997, pp. 1-17.

Jaffe, H. H., y M. Orchin, *Symmetry in Chemistry*, Krieger, Nueva York, 1965.

Kahn, C., *The Verb 'Be' in Ancient Greek*, Reidel, Boston, 1973, pp. 85-184.

Kaplan, J. (ed.), *Bartlett's Familiar Quotations*, 17ª ed., Little Brown, Nueva York, 2003. *(Cf*. el testimonio presentado ante el gran jurado por William Jefferson [Bill] Clinton, 17 de agosto de 1998.)

Kauffman, S. A., *The Origins of Order: Self-Organization and Selection in Evolution*, Oxford University Press, Nueva York, 1993.

King, R. B., "Chemical Applications of Group Theory and Topology. VIII. Topological Aspects of Oscillating Chemical Reactions", *Theoretica Chimica Acta*, vol. 56, núm. 4, 1980, pp. 269-296.

Klee, R. L., "Micro-determinism and Concepts of Emergence", *Philosophy of Science*, vol. 51, núm. 1, 1984, pp. 44-63.

Kronz, F. M., y J. T. Tiehen, "Emergence and Quantum Mechanics", *Philosophy of Science*, vol. 69, núm. 2, 2002, pp. 324-347.

Lawvere, F. W., y S. H. Schanuel, *Conceptual Mathematics: A First Introduction to Categories*, Cambridge University Press, Cambridge, 1997.

Lewis, D. K., *Parts of Classes*, Blackwell Press, Oxford, 1990.

Martin, R. M., *Logical Semiotics and Mereology*, Benjamins, Filadelfia, 1992.

Millikan, R. G., *On Clear and Confused Ideas: An Essay about Substance Concepts*, Cambridge University Press, Nueva York, 2000.

Newman, D. V., "Emergence and Strange Attractors", *Philosophy of Science*, vol. 63, núm. 2, 1996, pp. 245-261.

Rescher, N., *The Coherence Theory of Truth*, Clarendon Press, Oxford, 1973.

———, y P. Oppenheim, "Logical Analysis of Gestalt Concepts", *British Journal of the Philosophy of Science*, vol. 6, núm. 22, 1955, pp. 89-106.

Rosen, J., *Symmetry in Science: An Introduction to the General Theory*, Springer-Verlag, Nueva York, 1995.

Silberstein, M., y J. McGeever, "The Search for Ontological Emergence", *The Philosophical Quarterly*, vol. 49, núm. 195, 1999, pp. 182-200.

Simons, P., *Parts: A Study in Ontology*, Clarendon Press, Oxford, 1987.

Suppes, P., "Representation Theory and the Analysis of Structure", *Philosophia Naturalis*, vol. 25, núm. 3-4, 1988, pp. 254-268.

Van Fraassen, B., *Laws and Symmetry*, Clarendon Press, Oxford, 1989.

———, *Quantum Mechanics: An Empiricist View*, Clarendon Press, Oxford, 1991.

———, "Structure: Its Shadow and Substance", en R. Jones y P. Ehrlich (eds.), *Reverberations of the Shaky Game: Essays in Honor of Arthur Fine*, Oxford University Press, Oxford, 1999.

Wigner, E. P., *Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra*, ed. ampl., Academic Press, Nueva York, 1959.

Wilson, J., "How Superduper does a Physicalist Supervenience Need to Be?", *Philosophical Quarterly*, vol. 49, núm. 194, 1999, pp. 33-52.

Wussing, H., *Genesis of the Abstract Group Concept*, A. Shenitzer (trad.), MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1984.

---

[*] Departamento de Química, Universidad de Georgetown, 502 W Broad St, Suite 501, Falls Church VA 22046, EUA. Dirección electrónica: earleyj@georgetown.edu

[1] Este grupo de simetrías no determina la longitud del enlace B-F, un factor de escala de la molécula BF_3.

[2] En la segunda mitad del siglo XX se logró una mayor aplicabilidad general de la *teoría de categorías* (Lawrence y Schanuel, 1997). Esto muestra que la teoría de grupos puede considerarse un caso especial de enfoque aún más incluyente.

[3] Recuérdese el muy citado comentario de Bill Clinton: "Depende de lo que signifique la palabra 'es' " (Kaplan, 2003).

[4] Llamada "la transformación galileana".

[5] Así como un cristal puede llenar un espacio tridimensional, así también tal sistema químico oscilante puede llenar todo el tiempo (Earley, 1998, 1999a-e).

[6] Al menos con respecto a algunas interacciones.

[7] Esto da por sentado que los medios de reacción son efectivamente constantes, de manera que pueden usarse concentraciones y no "actividades" (concentraciones efectivas).

[8] La ecuación (1) puede escribirse de manera más concisa como la ecuación (2):

$$\sum_i \mu_i S_i = 0 \quad (2)$$

Aquí S_i se refiere a cualquiera de las especies i implicadas en la reacción, sea como reactivos o como productos. El coeficiente estequiométrico de la especie i-ésima es μ_i, tomado con signos opuestos para reactivos y productos. Usando esta notación más concisa, las ecuaciones cinéticas que describen cuán rápidamente ocurre la reacción pueden escribirse así:

$$\frac{1}{\mu_i}\frac{\mathrm{d}S_i}{\mathrm{d}t} = \sum_1^j k_j \prod_i S_i^{v_{ij}} \quad (3)$$

S_i es cualquier componente específico del sistema, y μ_i es el coeficiente estequiométrico correspondiente. Los valores k_j son las constantes de tasa de las secuencias mecanicistas que contribuyen a la reacción global, y los términos v_{ij} especifican cómo la tasa de cada secuencia de reacciones depende de cada concentración. Los valores v_{ij} no tienen que estar directamente relacionados con μ_i.

[9] Como no es posible revertir la dirección del tiempo a fin de convertir un estado posterior en uno anterior, no es posible ninguna operación inversa en el sistema de reacciones químicas: tales sistemas se describen con semigrupos y no con grupos.

[10] Éste es un espacio n-dimensional en el que cada dimensión corresponde a una concentración de uno de los componentes n de la mezcla de reacción.

[11] En lo sucesivo, tal estado se designará con el neologismo “estado de equilibrio virtual”.

[12] Éstos son componentes de la mezcla de reacción que cambian de concentración en el transcurso de la reacción. Las concentraciones de otros componentes se consideran aproximadamente constantes.

[13] La adición de autocatálisis puede desestabilizar ese estado de equilibrio, pero la autocatálisis requiere, o bien un tercer reactivo de referencia, o bien una reacción trimolecular.

XII. LOS SISTEMAS PERIÓDICOS DE MOLÉCULAS

Presupuestos, problemas y perspectivas

RAY HEFFERLIN*

Daß er [König Salomo] mir die Geheimnisse der Natur diktiert?
Den Zusammenhang aller Dinge?
Das System aller möglichen Erfindungen?

Möbius, en *Die Physiker*, de Friedrich Dürrenmatt; Robert E. Hebling (ed.), Oxford University Press, 1965

Introducción

Presentamos a los químicos profesionales una muestra de los aspectos filosóficos e históricos de la empresa científica, y a los filósofos e historiadores, un atisbo de la ontología y la epistemología de los científicos. El relato se basa en una familiaridad personal con participantes vivos de lo que es un área de la química relativamente pequeña y bien definida: la de crear, probar y utilizar organizaciones de símbolos moleculares integrados en dos o más dimensiones. Estos sistemas periódicos cumplen la misma función respecto de las moléculas que la tabla periódica de los elementos en relación con los átomos individuales. Se exploran los presupuestos que, a varios niveles, contribuyeron a la creación de los sistemas periódicos moleculares. Se exponen los problemas con que se enfrentan algunos sistemas, incluidos la dificultad para visualizarlos en múltiples dimensiones y el reto de encontrar, no símbolos moleculares, sino combinaciones lineales de símbolos en los compartimientos de una tabla. Al ir de los átomos a las moléculas biatómicas y de allí a las de mayor tamaño, se observa la emergencia de nuevos fenómenos. Se presentan las perspectivas de mayor madurez y utilidad de los sistemas periódicos.

PARA QUIÉN ESTÁ ESCRITO ESTE CAPÍTULO Y CÓMO SE HA ORGANIZADO

El propósito de este capítulo es investigar los presupuestos, problemas y perspectivas de los sistemas periódicos de moléculas. No debería plantear ningún problema a los lectores que tienen un conocimiento amplio de la química, están medianamente familiarizados con estos sistemas periódicos y desean entenderlos desde el punto de vista filosófico o histórico. Sin embargo, el capítulo se concibió pensando en lectores que tienen menos formación en química, ninguna familiaridad con los sistemas periódicos o pocas nociones de matemáticas, pero a quienes les interesa la filosofía o la historia de la ciencia. El autor se propone explicar los supuestos, obstáculos y futuras direcciones de la investigación, sin que sea necesaria una comprensión minuciosa de cada proyecto investigativo. Es una ventaja que la investigación de los sistemas periódicos sea un campo pequeño; el número de anécdotas es limitado y se puede incluir la mayoría de ellas.

Las secciones "¿Por qué conviene construir o usar un sistema periódico de moléculas?" y "¿Qué presupuestos son comunes al trabajo en todos los sistemas periódicos?" se ocupan de la importancia de las clasificaciones periódicas y los presupuestos que todos sus creadores parecen haber sostenido. La sección "¿Cuánto ha avanzado el campo de los sistemas periódicos moleculares?" trata de cómo ha progresado la investigación en las dos clases de sistemas periódicos, y el cuadro XII.1 muestra dónde se encuentra en la actualidad.

A partir de este punto el relato se divide en dos vertientes. Una de ellas, en las secciones "¿Qué presupuestos revelan los sistemas periódicos físicos?"; "Perspectivas de los mejores sistemas periódicos moleculares físicos de *N* átomos", y "¿Qué problemas surgen al cotejar con datos existentes y predecir nuevos datos?", consiste en los presupuestos, problemas y perspectivas de un tipo de clasificaciones moleculares: los sistemas periódicos físicos. La segunda vertiente, en las secciones "Perspectivas de los sistemas periódicos químicos de moléculas"; "El sistema hiperperiódico de Babáiev y sus perspectivas"; "¿Qué presupuestos revela la creación de sistemas periódicos químicos?", y "¿Qué problemas surgen al cotejar con datos existentes y predecir nuevos datos con sistemas químicos?", está compuesta por los presupuestos, problemas y perspectivas del otro tipo de clasificaciones moleculares: los sistemas químicos, pero en distinto orden. Las perspectivas ocupan las secciones "Perspectivas de los sistemas periódicos químicos de moléculas" y "El sistema hiperperiódico de Babáiev y sus perspectivas"; los presupuestos son materia de la sección "¿Qué presupuestos revela la creación de sistemas periódicos químicos?", y los problemas se encuentran en la sección "¿Qué problemas surgen al cotejar con datos existentes y predecir nuevos datos con sistemas químicos?" Las dos vertientes del relato convergen en la sección "¿Cuáles son las perspectivas generales de los sistemas periódicos moleculares?", donde se consideran las perspectivas generales de todo el esfuerzo.

Con mucha frecuencia se usan expresiones como "sistema periódico físico de moléculas"; no parece apropiado el empleo de siglas como SPFM.

¿POR QUÉ CONVIENE CONSTRUIR O USAR UN SISTEMA PERIÓDICO DE MOLÉCULAS?

Un sistema periódico de moléculas es la representación de símbolos moleculares en un espacio que tiene ejes relacionados con alguna propiedad o propiedades de los átomos constitutivos, o con alguna enumeración de los constituyentes atómicos. Tales espacios son "espacios químicos", que no deben confundirse con el "espacio de propiedad química" usado en el estudio de la semejanza química.

Han sido tres las razones de querer *crear* un sistema periódico de algunas o todas las moléculas. La primera, organizar inmensos números de especies dándoles alguna forma elegante (sí, como coleccionar estampillas). La segunda, ofrecer a la empresa educativa una representación gráfica de tendencias entre las propiedades moleculares (con la esperanza adicional de que algunas de las tendencias sorprendan al *establishment* investigativo). La tercera, simplemente satisfacer la curiosidad. Las tres razones corresponden al espíritu de la ciencia "pura".

El deseo de *usar* un sistema periódico de moléculas para fines predictivos ha tenido dos razones. Éstas incumben al espíritu de la ciencia "aplicada". La primera es obtener datos numéricos que otros científicos necesitan e incluso exigen. De hecho, hay una gran necesidad de datos para estudiar las atmósferas de la Tierra, los planetas y las estrellas; el medio interestelar, y las nebulosas y otros objetos celestes. Existe también una seria necesidad de datos en estudios de la combustión en motores, hornos e incineradores, y en la investigación de temas tan diversos como toxicidad, farmacología, cosmetología y tecnología de pinturas. Hay otros campos muy activos de la química cuyos practicantes intentan satisfacer las mismas necesidades. Entre ellos están la búsqueda de relaciones cuantitativas entre la estructura y las propiedades moleculares (QSPR, por sus siglas en inglés) y la de un índice numérico único para cada gráfica molecular. El trabajo en estos y otros campos relacionados es difícil, por lo que el esfuerzo paralelo de construir sistemas periódicos ha echado raíces. La segunda razón del afán de hacer predicciones es la comprensión del arquitecto de que su sistema periódico no gozará de credibilidad a menos que dé lugar a predicciones de datos moleculares. Babáiev y Hefferlin (1996, p. 62) dan una lista de razones parecida, pero bajo el encabezado "Necesidades filosóficas, psicológicas, educativas y pragmáticas".

¿QUÉ PRESUPUESTOS SON COMUNES AL TRABAJO EN TODOS LOS SISTEMAS PERIÓDICOS?

Esta sección está basada en discusiones y una correspondencia de más de dos décadas con los otros siete investigadores vivos que han creado sistemas periódicos moleculares (y, por supuesto, en la propia experiencia del autor). Todos ellos comparten la creencia de que el universo del discurso es comprensible y de que nuestros modos de pensar y comunicarnos al respecto son adecuados.

Se podría suponer que a los investigadores, motivados por una o más de las razones enumeradas en la sección que antecede, o al encontrarse con algún sistema periódico preexistente, se les ocurrió qué aspecto podría tener a grandes rasgos un sistema mejor; que hicieron una búsqueda inmediata en la literatura, y que, por último, completaron tentativa o confiadamente los detalles del sistema, cotejándolos con datos obtenidos de artículos o tablas críticas. Tal suposición no tiene en cuenta en absoluto lo poderosa que es la experiencia de que se nos ocurra crear un sistema periódico de *moléculas*. Tanto cautivó la idea a cada quien, que los detalles se completaron rápidamente, sin búsqueda en la literatura. En cinco casos no había familiaridad previa más que con la tabla de Mendeléiev; en un sexto caso también se conocía la ley del desplazamiento del hidrógeno de Grimm, y en el séptimo y el octavo casos se sabía de trabajos relacionados, como la búsqueda de QSPR o de índices gráficos. De los cinco primeros investigadores, a dos les acudió a la mente la noción creadora al conocer un sistema periódico de moléculas anterior, y los procedimientos para crear sistemas nuevos propios surgieron claramente de inmediato. A uno de ellos se le ocurrió la idea sin ver otro sistema, encontrándose bajo un tedioso pero afortunado arresto domiciliario, durante la Revolución cultural en China.

CUADRO XII.1. *Primera publicación, autor y rasgos distintivos de sistemas periódicos moleculares*

Publicación	*Autor*	*Rasgos distintivos*	N	*Ejes*	*Clase*
1862	Newlands	Moléculas orgánicas dispuestas en tabla	Cualquiera	2	Químico
1907	Morozov	Alcanos y elementos en yuxtaposición	Cualquiera	2	Químico
1929	Grimm	Ley del desplazamiento del hidrógeno; semejanza de producto exterior	Hasta 5	2	Químico
1935	Clark	Todas menos los hidruros, asociadas a una tabla originadora única	2	2	Físico
1936	Clark	Hidruros en una tabla parecida a su tabla originadora	2	2	Físico
1969	Syrkin	Dímeros, hidruros, óxidos, fluoruros	2	2	Físico
1971	Gorski	Carga nuclear efectiva, capas, potenciales redox y tendencias ácido-base	Cualquiera	5	Químico
1976	Colaboración SAU	Dímeros, hidruros, óxidos, fluoruros	2	2	Físico
1979	Colaboración SAU	Todas las especies ordenadas por (C_1, C_2); R_1 y R_2 combinados	2	3	Físico
1984	Monyakin	Todas las especies ordenadas por (R_1, R_2); C_1 y C_2 combinados	2	3	Físico
1980	Hall	Capacidad para dar electrones *versus* capacidad para recibir electrones	Cualquiera	2	Químico
1982	Dias	Sextetos bencenoides	Fórmula	2	Químico
1982	Haas	Grupos funcionales; medios propios; sigue a Grimm	Cualquiera	2	Químico

Publicación	*Autor*	*Rasgos distintivos*	N	*Ejes*	*Clase*
1982	Kong	Biatómicas del grupo principal; suma de periodos *versus* suma de grupos	2	2	Físico
1983	Kaslin	Todas las biatómicas, menos moléculas de tierras raras	2	2	Físico
1983	Colaboración SAU	Producto exterior para moléculas de N átomos	2	4	Físico
1983	Colaboración SAU	Multipletes reductibles de $SO(3) \times SU(2)$	2	4	Físico
1984	Colaboración SAU	Más de la primera entrada de la SAU de 1983; también especies isoelectrónicas y ionizadas	N	$2N$	Físico
1984	Huang	Todas las moléculas triatómicas	3	2	Físico
1989	Kong	Moléculas triatómicas del grupo principal	3	3	Físico
1990	Voskresenski	Átomos no de hidrógeno, valencia, pares aislados, MO, etc.	Cualquiera	6	Químico
1991	Dias	Sextetos bencenoides resonantes	Fórmula	2	Químico
1994	Boldyrev y Simon	Moléculas en eje $(C_1 + C_2)$, en orden $(R_1 + R_2)$	2	2	Físico
1992	Dias	Hidrocarburos fluoranoides	Fórmula	2	Químico
1992	Dias	Hidrocarburos indacenos	Fórmula	2	Químico
1992	Colaboración SAU	Representaciones irreductibles de $SO(3) \times SU(2)$	2, 3	4	Físico
1994	Colaboración SAU	Representaciones irreductibles de $SO(2, 1)$	2, 3	4	Físico
1994	Colaboración SAU	Representaciones irreductibles de $SU(v)$	Cualquiera	1	Físico
1996	Babáiev	Bosquejo de sistema general global de moléculas	Cualquiera	2	Químico

Los cinco primeros investigadores supusieron enseguida que podían insertar todos los símbolos moleculares posibles en el sistema que concibieron. Esta suposición es equiparable a dar por sentada la existencia de todas las moléculas cuyos símbolos escribieron o imaginaron. Para decirlo de manera aún más contundente, tal suposición implica la *predicción* de que se descubrirán o describirán experimentalmente estos millares de moléculas, o se computarán sus propiedades. No implica la predicción de que todas estas especies serán estables en condiciones normales. Pueden existir sólo en las condiciones más insólitas y, aun así, las moléculas o estados moleculares pueden ser transitorios.

Del sexto y el séptimo investigadores, uno comprendió que quizá fuera posible ampliar la ley del desplazamiento del hidrógeno para hacer una clasificación de grupos funcionales. El otro, sospechando que quizá hubiera una periodicidad molecular (además de aquella que presentan los elementos), buscó expandir la tabla de los elementos a otras dimensiones que contuvieran tablas de moléculas y, al hacerlo, incluir la "hiperperiodicidad".

El cuadro XII.1 presenta un listado cronológico de los sistemas periódicos propuestos. Enumera los aspectos que distinguen a cada sistema, los números de átomos de las moléculas incluidas y la dimensionalidad de los espacios en que se construyen los sistemas.

El cuadro no consigna una entrada correspondiente a la tabla de Mendeléiev porque éste no llegó a bosquejar una tabla específica de especies moleculares. El bello tratamiento grupo-dinámico del tetracloruro de carbono de Komarov y Lyakhovskii (1986) se omite porque no dio origen a una representación gráfica. Se excluye el diagrama triangular de Allen (1992) porque comprende sólo unas cuantas moléculas y éstas se muestran únicamente para ilustrar varias clases y grados de enlace. Tampoco hay en el cuadro entradas de clasificaciones que, aun llamándose "sistemas periódicos", no tienen lugares específicos para moléculas concretas. Ejemplo de lo anterior es el elegante conjunto de curvas de potencial reducido que presenta Jenč (1996). Las siglas SAU se refieren a la Southern Adventist University.

El cuadro XII.1 indica la pertenencia a una de las dos clases de sistemas periódicos moleculares. Los de la primera clase utilizan los números de periodo o los números de grupo de sus átomos según la tabla de los elementos, o alguna función de ellos. Los sistemas periódicos de esta clase ("sistemas periódicos físicos" según la definición de Hefferlin y Burdick, 1994) siempre incluyen moléculas de un solo número fijo, N, de átomos. En principio, N puede ser arbitrariamente grande; sin embargo, pronto se verá que, en la práctica, N es probablemente inferior a 5.

Los sistemas de la segunda clase comprenden moléculas que tienen varios átomos. Incluyen un conjunto de moléculas de las cuales el investigador tiene muchos datos confiables conocidos. Un ejemplo notable es la tabla periódica de grupos funcionales propuesta por Haas (1982, 1983, 1984), que puede usarse fácilmente para clasificar las especies, de cualquier número de átomos, que contienen halógenos (sección "Sistema periódico de grupos funcionales de Haas, y sus perspectivas"). Los sistemas periódicos de esta segunda clase ("sistemas periódicos químicos", Hefferlin y Burdick, 1994) a menudo no emplean ninguna de las coordenadas de la tabla de los elementos, aunque en un caso la suma de los números de grupo atómico es una variable independiente.

No es propósito de este capítulo repetir las reseñas que dan Hefferlin (1989a, cap. 12; 1994), y Hefferlin y Burdick (1994), de estos sistemas periódicos. Algunos sistemas se explican en la medida de lo necesario para entender los supuestos, obstáculos o futuras direcciones investigativas únicos asociados con ellos. En este punto cabe señalar cómo algunas contribuciones influyeron específicamente en trabajos posteriores. Por ejemplo, el sistema tridimensional de la SAU de 1979 (Hefferlin *et al*., 1979) evolucionó para dar lugar al sistema de producto de matriz exterior (Hefferlin, 1994). También condujo, en un camino paralelo, al desarrollo de sistemas basados en la dinámica de grupos (Zhuvikin y Hefferlin, 1983; Hefferlin *et al*., 1984; Zhuvikin y Hefferlin, 1992, 1994; Carlson,

Hefferlin y Zhuvikin, 1995; Carlson *et al.* , 1996). La ley del desplazamiento del hidrógeno de Grimm (Grimm, 1925) dio lugar directamente a la tabla periódica de grupos funcionales de Haas. Las espléndidas clasificaciones de moléculas triatómicas del grupo principal de Kong (en Hefferlin, 1989a, cap. 11) rigieron directamente su ampliación por Huang (sin publicar) para incluir moléculas de metales de transición.

Los científicos consideran imperativo que la teoría se corrobore mediante pruebas empíricas, y deben esperar que otros (el auditorio, los revisores técnicos o el colectivo de investigadores) insistan en que se demuestre que un sistema periódico concuerda con los datos. La demostración en este caso consiste en representar gráficamente los datos (figuras XII.1-XII.6).

La demostración también se ha realizado mediante ajuste por mínimos cuadrados o mediante adiestramiento y validación de redes neuronales. Ambos métodos han dado lugar a grandes números de pronósticos de datos de moderada exactitud (Carlson *et al.*, 1997; Wohlers *et al.*, 1998; Hefferlin, Davis e Ileto, 2003).

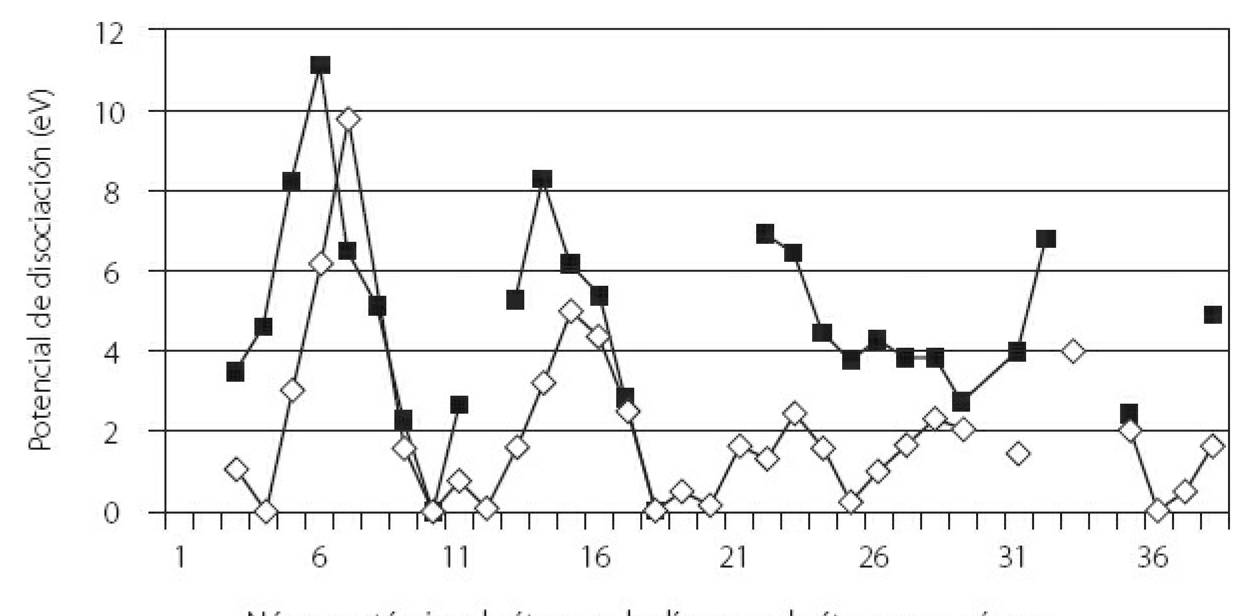


FIGURA XII.1. *Potenciales de disociación de moléculas biatómicas homonucleares, trazados sobre cada uno de los dos números atómicos (gráfica inferior, diamantes), y de monóxidos trazados sobre el átomo oxidado (gráfica superior, cuadrados). Los picos desplazados se deben a la isoelectronicidad.*

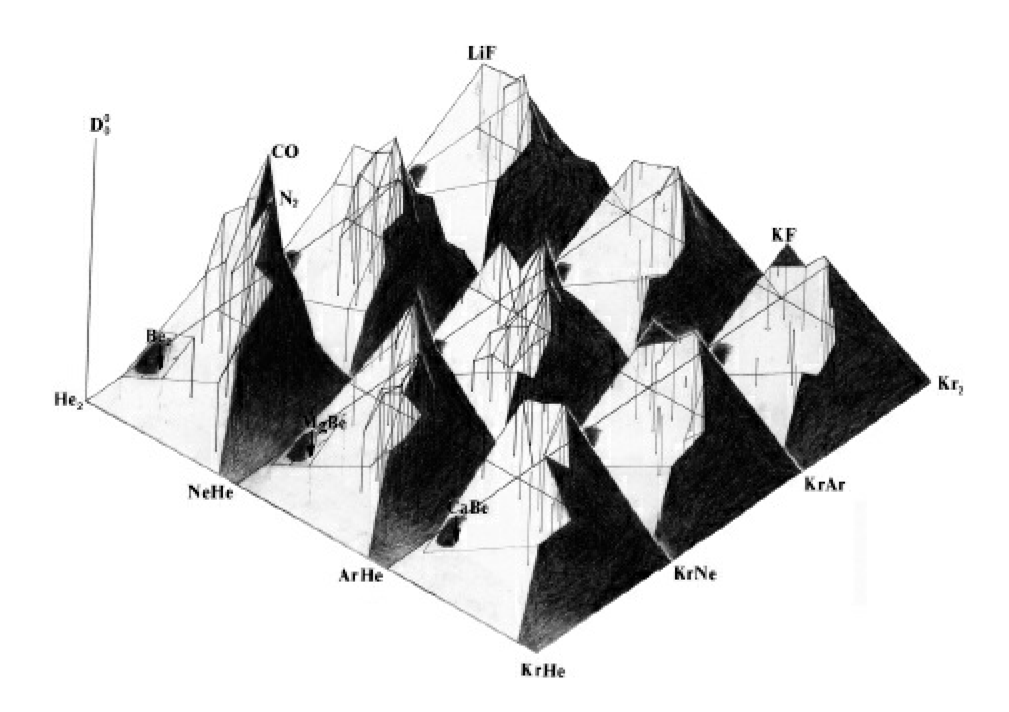


FIGURA XII.2. *Potencial de disociación "verticalmente", y Z_1 y Z_2 de 2 a 36 "horizontalmente", en proyección casi isométrica. Se han recortado las moléculas de metales de transición y tierras raras, y las piezas resultantes de la superficie se han deslizado y unido a otras a menor Z. Las moléculas homonucleares están en la diagonal de la izquierda, y el terreno es simétrico respecto a un plano vertical que atravesara esa diagonal. Cualquier serie de moléculas isoelectrónicas tiene posiciones que corren horizontal y perpendicularmente con respecto a ese plano. La escala se establece por el valor de N_2 (9.79 eV), que se encuentra entre los picos de CO y OC. La figura se construye a partir de gráficas de barras, dibujando líneas de mínimo descenso desde cada pico, "tendiendo" una superficie desde esas líneas hacia abajo hasta los valles de 0 eV de moléculas de gases nobles. Además, se intenta indicar cráteres en cuyo fondo se encuentran los pares alcalinotérreos.*

Semejanza con la tabla periódica

Suele creerse que la mecánica cuántica es suficiente para recrear la tabla de los elementos. Aunque así fuera, la mecánica cuántica no justifica en absoluto el presupuesto de que un sistema molecular deba parecerse a la tabla de los elementos. Así, la idea de que la construcción de un sistema periódico físico requiere alguna semejanza con la tabla de los elementos reúne las condiciones de una conjetura. Considérense, por ejemplo, los sistemas diatómicos. Las arquitecturas de Kong (Kong, 1982, 1989) han localizado las moléculas por medio de dos coordenadas: un eje de grupo basado en las sumas de los números del grupo atómico, y un eje de periodo basado en las sumas de los números del periodo atómico. Otra arquitectura separa los números de grupo de los dos átomos y combina (p. ej., multiplica) sus números de periodo para formar un total de tres ejes (Hefferlin, 1989a, cap. 12; 1994). Las moléculas con varias combinaciones de átomos (*ss, sp*, etc.) pueden organizarse en bloques separados. A la inversa, la arquitectura de Monyakin (Hefferlin, 1989a, cap. 12; 1994) separa los números de periodo de los dos átomos y combina (es decir, resta) los números de grupo para formar un total de tres ejes. En todos los casos, sin embargo, la tabla de los elementos ha proporcionado el punto de partida.

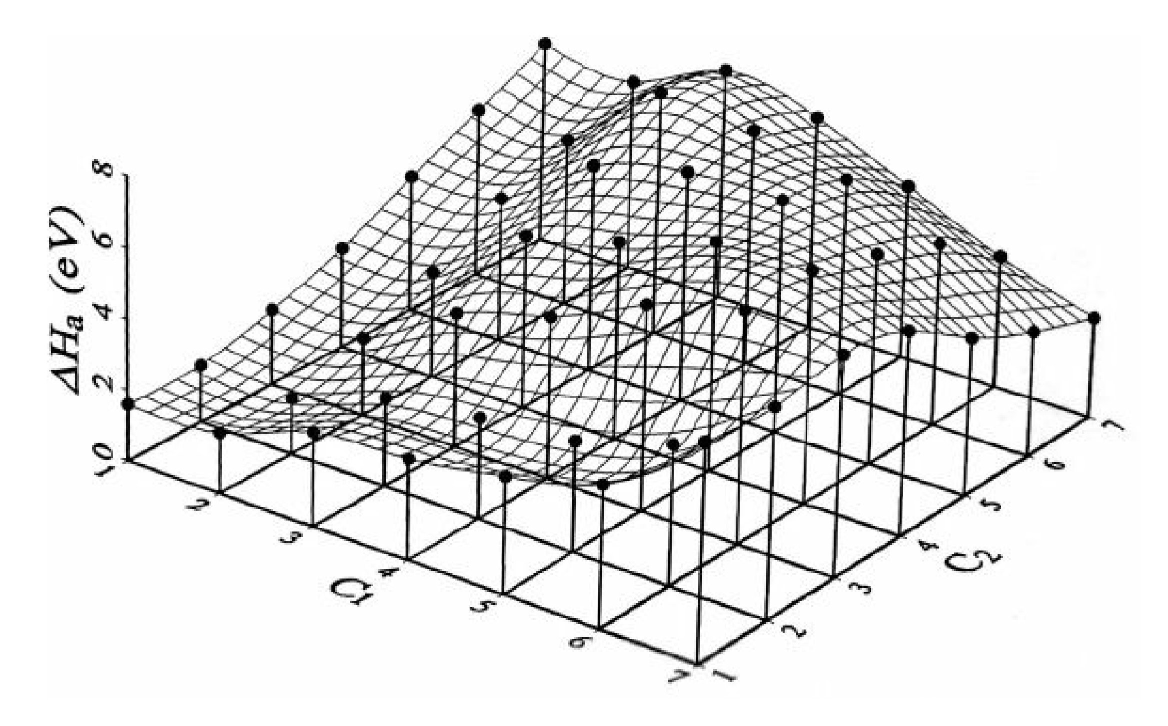


FIGURA XII.3. *Potencial de disociación en electrón-voltios verticalmente, y C_1 y C_2 (donde C_i es el número de grupo del átomo i) horizontalmente, en proyección isométrica. Li_2 está a la extrema izquierda y F_2 a la extrema derecha; esto es, los datos pertenecen a moléculas con números de periodo* $(R_1, R_2) = (2, 2)$. *Los puntos representan predicciones iniciales de redes neuronales (sin publicar) y no datos tabulados. La superficie tiende a*

que sus valores más altos se extiendan a lo largo de una línea cercana a la serie isoelectrónica con moléculas que tienen 10 electrones de valencia. También se observa un indicio de la depresión en Be_2, sólo porque había muy pocos pares alcalinotérreos en el conjunto de entrenamiento. Superficies muy similares, pero con alturas decrecientes, pertenecen a las predicciones de red neuronal de las moléculas del grupo principal con valores crecientes de (R_1, R_2*), fenómeno evidente en la figura XII.1. El símbolo tradicional del potencial de disociación es* ΔH_a *(entalpía de atomización). La superficie no se extiende hasta los valles donde se encuentran los datos de las moléculas de gases nobles.*

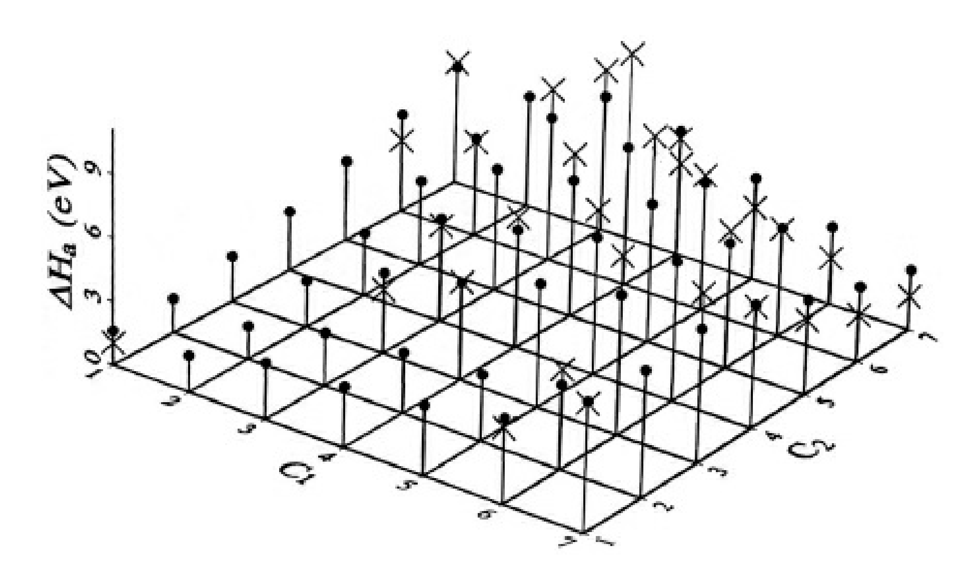


FIGURA XII.4. *Igual que la figura XII.3, salvo que la malla se ha retirado, dejando sólo los puntos, y se muestran los datos tabulados (X). Aunque no hay dato tabulado del Be_2, se introdujeron en la red neuronal datos de otros pares alcalinotérreos.*

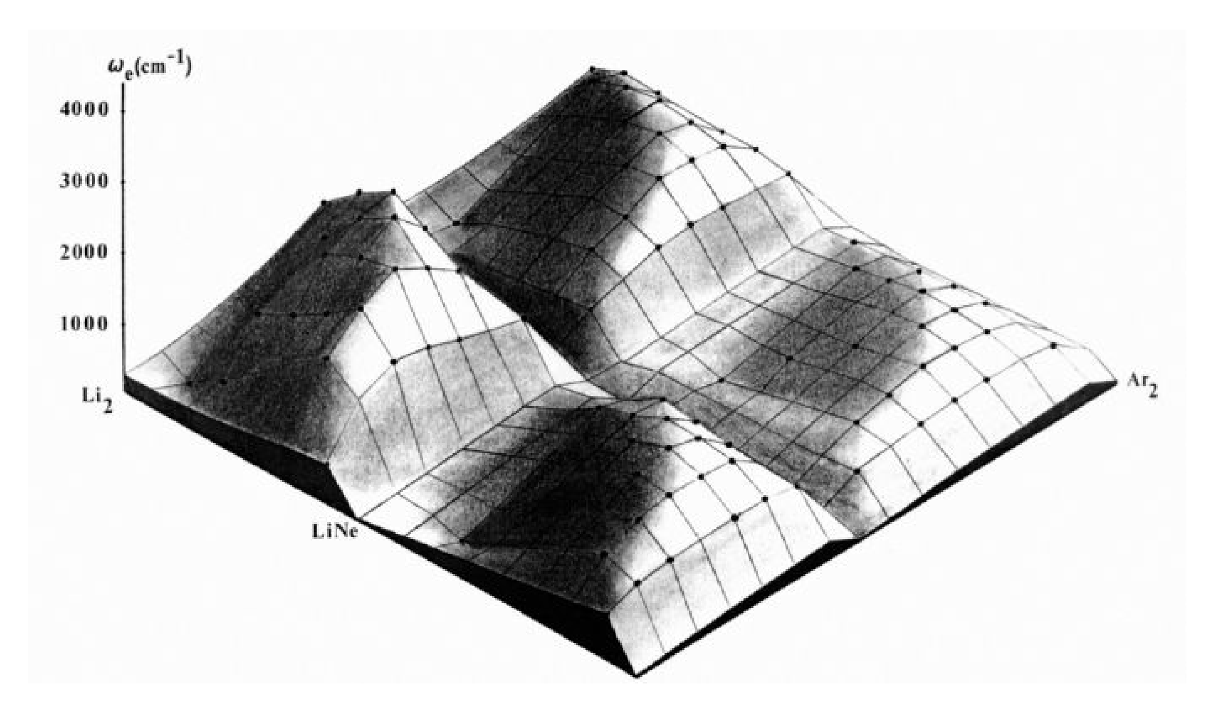


FIGURA XII.5. *Igual "frecuencia de vibración" en cm^{-1} verticalmente, y Z_1 y Z_2 de 2 a 18 horizontalmente, en la*

misma proyección que la figura XII.2. La figura se construyó a partir de gráficas de barras "tendiendo" el dibujo de una superficie sobre los datos tabulados (puntos) hasta los valles de moléculas de gases raros. Las profundidades de los valles se calcularon con base en los pocos datos existentes. Son claramente visibles las depresiones correspondientes a los datos situados en las posiciones de los pares alcalinotérreos. Esta figura se ha tomado, con permiso, de Periodic Systems and Their Relation to the Systematic Analysis of Molecular Data, *The Edwin Meller Press, Winter Springs, Florida, lámina 6.*

La suposición de semejanza revela un segundo presupuesto, más sutil. La tabla periódica coloca los elementos en columnas, o grupos, atendiendo a los números de sus electrones de valencia. Así, el nitrógeno se coloca en el grupo 5 (15 en el esquema de la IUPAC [Unión Internacional de Química Pura y Aplicada]), aunque con frecuencia expresa una valencia de tres. Las moléculas de periodo fijo con el mismo número total de electrones en la capa de valencia atómica (moléculas "isoelectrónicas", "horizontalmente isoelectrónicas" o "isostéricas", como N_2 y CO) por lo general tienen propiedades más parecidas que las moléculas seleccionadas al azar. Las moléculas cuyos átomos provienen de diferentes periodos pero que tienen los mismos números de electrones de valencia ("verticalmente isoelectrónicas" o "isovalentes" como las sales LiF, NaI y CsCl) suelen tener propiedades en cierto modo semejantes. Por tanto, la suma de la cantidad de electrones de valencia, esto es, la suma de los números de grupo atómico, es importante. Así, parece que usar la tabla de los elementos como patrón no es inconsecuente con el presupuesto de que la isoelectronicidad molecular es importante.

¿Es necesariamente cierto que alguna combinación de los números de *periodo* atómico tiene relevancia? El máximo número cuántico principal de las capas de electrones que se están llenando o acaban de llenarse determina la fila, o el periodo, de la tabla atómica en que se coloca un átomo. Así, todos los que están comprendidos desde el K al Kr están en el periodo 4. No hay ninguna combinación simple de números cuánticos principales atómicos que describa necesariamente un número cuántico de la configuración molecular. Por ejemplo, el boro está en el periodo 2, pero la configuración de B_2 es $(\sigma_g 1s)^2(\sigma_u 1s)^2(\sigma_g 2s)^2(\sigma_u 2s)^2(\pi_u 2p)^2$ o, en otra notación, $[He_2]$ $(\sigma_g 2s)^2$ $(\pi_u 2p)^2$; como esta configuración está en vías de volverse la de Ne_2, podría argüirse que el número de periodo molecular también es 2. El supuesto de que alguna combinación de números cuánticos principales atómicos define algún número cuántico principal de la configuración molecular no se ha usado de manera consecuente.

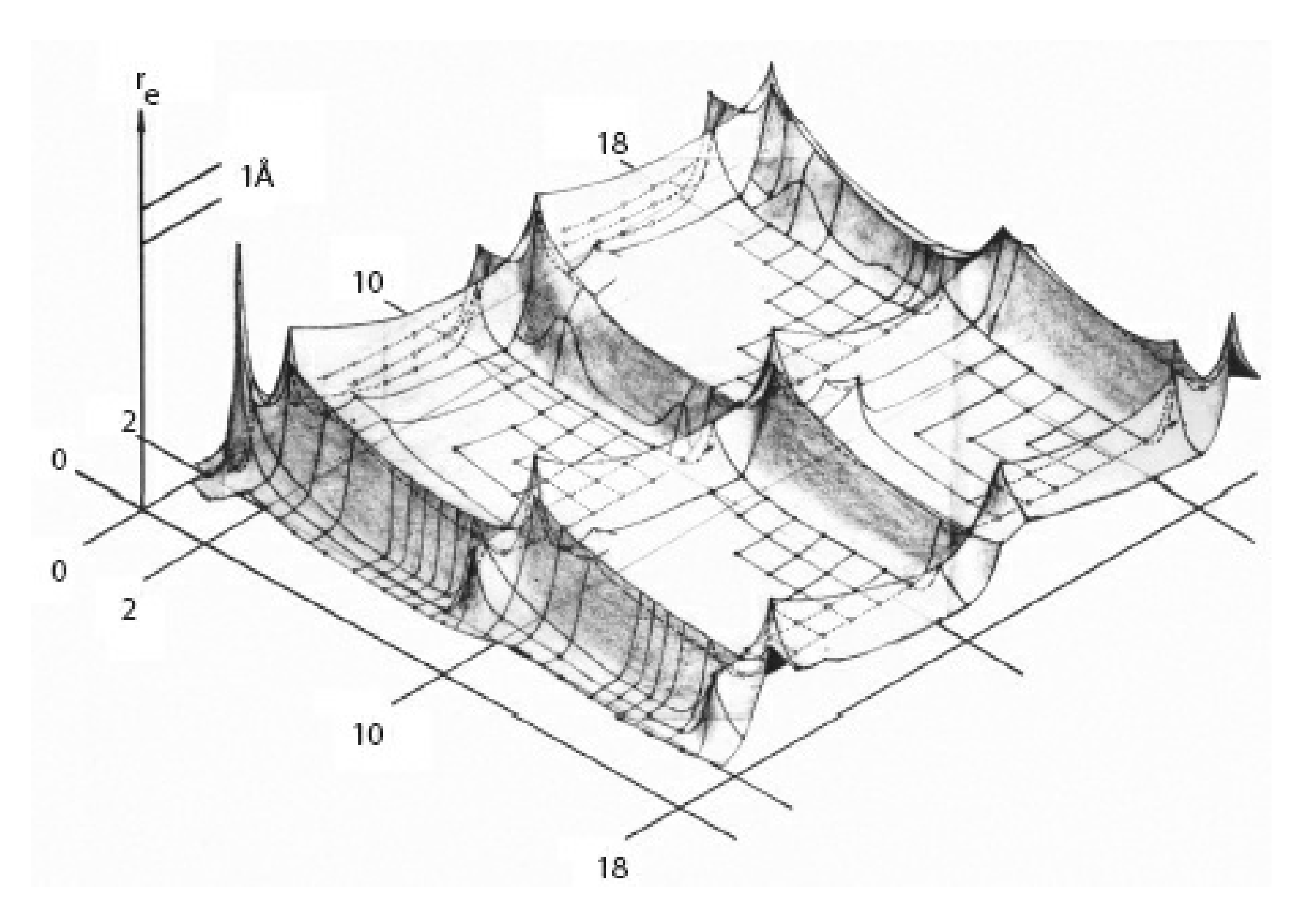


FIGURA XII.6. *Separación internuclear en estado fundamental en Å verticalmente, y* Z_1 *y* Z_2 *de −1/2 (hidruros monopositivos) a 19 horizontalmente, en la misma proyección que la* figura XII.2. *Las especies homonucleares de* H_2 *a* K_2 *se encuentran en la diagonal de izquierda a derecha. •, datos tabulados; o, datos tabulados ocultos por el relieve. La figura se hizo de la misma manera que la* figura XII.2, *atendiendo en particular a las "sillas de mono" situadas en las posiciones de los pares de gases nobles. Se han incorporado en la superficie iones de moléculas diatómicas. En Hefferlin, 1989a, cap. 8, y Hefferlin* et al., *1984, se muestra que si el dato* r_e *de una molécula ya ionizada se mueve –1/2 unidad en cada dirección "horizontal", entonces se ajusta bastante bien a la superficie de la molécula neutra. (El mismo resultado corresponde por lo general a las configuraciones electrónicas y a los potenciales de disociación [Hefferlin, 1989a, pp. 581-596].) La posición resultante de medio entero queda entre las posiciones de moléculas neutras. En cambio, una molécula doblemente ionizada como* He_2^{++} *se desplaza a la posición de una molécula neutra existente (en este caso* H_2*; los valores* r_e *son de 0.704 y 0.7414 Å, respectivamente).* He_2 *está en el centro de la silla de mono situada entre los dos picos de HeH. El ión molecular mononegativo* $LiCl^-$ *(2.18 Å) se desplaza a la posición del ión molecular monopositivo* $BeAr^+$ *(2.085 Å).* $BeAr^+$ *está sobre el flanco de la cresta situada en el extremo lejano de la figura, y* $LiCl^-$ *está en la parte posterior de esa misma cresta. Las estrechas concordancias de estos datos son notables si se considera lo accidentado de la superficie en que se encuentran.*

La elección de la tabla periódica de los elementos

Hay muchas versiones bidimensionales y tridimensionales de la tabla periódica de los elementos (Van Spronsen, 1969; Mazurs, 1974). Hay tablas "cortas", "largas" y otras basadas en las consideraciones de simetría de la dinámica de grupos (Barut, 1972; Rumer y Fet, 1971). Como la tabla de los elementos ha de ser un patrón para el sistema periódico molecular, la elección de la primera influirá mucho en el aspecto del segundo. El tercer supuesto que hace un diseñador de sistemas periódicos físicos tiene que ser, pues, que alguna tabla bidimensional es el mejor patrón para su sistema molecular.

La organización exclusiva de moléculas de N *átomos, de estructura dada*

Un cuarto supuesto ha sido que se debe comenzar por un sistema periódico de moléculas diatómicas. Entonces, si los resultados resultan prometedores y las circunstancias lo permiten, se continuaría el proceso usando el mismo método para abordar moléculas triatómicas lineales y cíclicas, las varias estructuras moleculares tetraatómicas y, de ser posible, moléculas aún mayores. Este supuesto era evidente en las sucesivas publicaciones relativas a sistemas diatómicos y luego triatómicos, de Kong y de Hefferlin y su grupo de colaboradores.

Dimensionalidad

El quinto supuesto se refiere al número de dimensiones que el sistema debería tener para maximizar su posibilidad de visualización y su utilidad. Con frecuencia se ha elegido la bidimensionalidad como carácter ideal para la publicación y fácil lectura de los sistemas, y a veces para evocar la tabla de los elementos (cuadro XII.1). Los sistemas periódicos tridimensionales permiten mayor resolución en la clasificación molecular, pero a costa de una pérdida casi total de la capacidad de cualquier persona para encontrar una molécula dada. La colaboración de la Southern Adventist University (SAU) ha comprobado que las dimensiones $2N$ son necesarias para construir los sistemas periódicos más generales de moléculas de N átomos (Hefferlin *et al.*, 1984; Hefferlin, 1994) y supone que tarde o temprano ingeniosos medios de visualización posibilitarán encontrar las moléculas.

Comenzar la clasificación con moléculas del grupo principal

Por último, solía considerarse obvio que la construcción inicial de sistemas de moléculas pequeñas debería empezar por moléculas del grupo principal y sólo posteriormente incluir moléculas en las que hubiera átomos de metales de transición ("moléculas de metales de transición") y átomos de tierras raras ("moléculas de tierras raras"). El presupuesto es natural si se considera que los datos de las moléculas del grupo principal son relativamente más abundantes. Lo ilustran las obras de Kong (sección "Sistema periódico de Kong y sus perspectivas"). Los hidruros a menudo se han tratado de manera separada, primero por Clark (1935), ya que sus propiedades también tienden a ser muy distintas.

Perspectivas de los mejores sistemas periódicos moleculares físicos de *N* átomos

El sistema periódico de Kong y sus perspectivas

Los sistemas periódicos de moléculas diatómicas y triatómicas de Kong (Kong, 1982, 1989) revisten una auténtica belleza. Son el filo dorado del negro nubarrón de su prolongado arresto domiciliario relacionado con la Revolución cultural en la República Popular de China. Sus sistemas colocan las moléculas en los compartimientos de una tabla plana de forma aproximada a la de la tabla de los elementos. Los números de periodo y grupo son las sumas de los números de periodo y grupo de los átomos.

Hay un número molecular que aumenta desde la esquina superior izquierda a la inferior derecha, en gran medida como ocurre con el número de carga de la tabla atómica. Este número es continuo por segmentos, y dentro de cada segmento es lineal con respecto a la suma de los números atómicos (pero no igual a ella). Las discontinuidades existen en parte porque los números se han reservado para las moléculas de metales de transición que no están presentes en los sistemas de Kong.

La construcción de la tabla periódica de Kong, usando sumas de filas y columnas, está en armonía con la aditividad o cuasiaditividad de algunas propiedades moleculares. Los números atómicos y los conteos de electrones son evidentemente aditivos; la suma de los pesos atómicos da los pesos moleculares exceptuando los efectos de las energías de enlace. Las separaciones internucleares de las moléculas diatómicas son (generalmente por definición) aditivas cuando se las compara con radios atómicos covalentes o radios iónicos de especies cargadas (Campbell, 1970). Hay otras propiedades aditivas menos conocidas (Hefferlin, 1989a, cap. 13).

Muchos de los compartimientos de las tablas de Kong contienen varias moléculas; de hecho, el trabajo que introduce su sistema de moléculas diatómicas se acompaña de un glosario que enumera las moléculas contenidas en cada compartimiento. La lista es bidimensional (ordenada según las diferencias del periodo y los números de grupo de los átomos), lo cual hace pensar que la tabla de Kong es en realidad una proyección en el espacio bidimensional de una arquitectura tetradimensional.

Una perspectiva de la elegante construcción de Kong es que puede extenderse a moléculas tetraatómicas; ya se ha realizado un análisis de datos preliminar. Falta por ver si puede lograrse lo mismo en el caso de moléculas mayores. Otra perspectiva posible es la preparación de tablas que incluyan todas las moléculas de los compartimientos de los sistemas periódicos de moléculas triatómicas y tetraatómicas de Kong; deben requerir diferencias de fila y columna de cuatro y seis átomos, respectivamente, si se emplea el mismo procedimiento que en el caso de las moléculas diatómicas.

El sistema periódico de Boldyrev, Gonzales y Simons, y sus perspectivas

El sistema periódico de Boldyrev, Gonzales y Simons (1994) ofrece datos a simple vista. Las moléculas diatómicas están dispuestas en dirección horizontal según las configuraciones electrónicas, y en dirección vertical, sin espacios vacíos, según la suma de los números atómicos. Como no hay espacios vacíos, y como existen muchas más moléculas en sumas de grupos hacia la parte media del eje de configuración que en los extremos, la suma de números atómicos varía a lo largo de una línea horizontal dada. En otras palabras, un eje vertical de sumas de números atómicos se ha contraído parcialmente por motivos de concisión. En consecuencia, se han preparado tablas de tres paredes (Boldyrev y Simons, 1997): una para moléculas del grupo principal, la segunda para moléculas con un átomo del grupo principal y uno de metal de transición, y la tercera para moléculas constituidas por metales de transición. Entre las perspectivas de esta útil tabla se incluyen la publicación de un libro y varios discos compactos que contienen mucha mayor información sobre cada molécula.

El sistema de la SAU y sus perspectivas

La colaboración de la SAU entre Hefferlin, estudiantes de pregrado de diversas universidades y (de manera intermitente) colegas de todo el mundo, ha dado por resultado el más general sistema periódico de moléculas físico $2N$ dimensional. Con las selecciones adecuadas de las tablas de los elementos, este sistema periódico molecular puede reproducir todos los detalles *ad hoc* de todos los demás sistemas periódicos físicos del cuadro XII.1, excepto unos pocos, y permite la creación de otros. Por ejemplo, los sistemas de Clark (1935) y Kaslin (1983a, 1983b, 1985) son "acolchados" compuestos de cortes transversales de la arquitectura general de cuatro dimensiones. Los sistemas de Kong (1982, 1989) son proyecciones bidimensionales de la arquitectura tetradimensional. La propuesta de Monyakin (Hefferlin, 1989a, cap. 12) es una contracción tridimensional de su arquitectura tetradimensional, formada por la combinación de dos de los cuatro vectores básicos.

El sistema de la colaboración de la SAU tiene una formulación teórica *ad hoc*. Una tabla atómica originadora se considera como una matriz de elementos iguales a cero, de dos subíndices; se forma sustituyendo los ceros apropiados de la matriz con símbolos de los elementos. El producto exterior de esta matriz consigo misma se toma una vez para crear el sistema periódico de las moléculas diatómicas, dos veces para las moléculas triatómicas (acíclicas o cíclicas), y así sucesivamente. El resultado es una matriz de cuatro, seis o más subíndices de esas moléculas.

Es posible imaginar una matriz de cuatro subíndices como un cuadro tetradimensional de símbolos; uno de seis subíndices como un cuadro hexadimensional, etc.; estos cuadros son el sistema periódico (Hefferlin y Kuhlman, 1980; Hefferlin, 1989a, cap. 10). En general, el producto exterior se toma $N - 1$ veces para crear el sistema periódico $2N$ dimensional de moléculas de N átomos.

Las filas de ocho elementos de la tabla periódica se han equiparado con octavas musicales; en la medida en que esta analogía es válida, tales sistemas periódicos permiten armonías bifónicas, trifónicas y polifónicas.

Algunas propiedades moleculares son cuasiaditivas (sección "Sistema periódico de Kong y sus perspectivas"). Esta aditividad puede conciliarse con la multiplicación antes descrita considerando los datos moleculares como exponentes de alguna base, por ejemplo el número natural e.

La principal perspectiva *científica* de los sistemas de la SAU es la publicación de atlas, el primero de los cuales contiene cálculos predictivos de separaciones internucleares de moléculas diatómicas (Hefferlin, Davis e Ileto, 2003), y el segundo presenta frecuencias de vibración (Davis y Hefferlin, en preparación). La perspectiva de aceptación *pública* de un sistema periódico tan general podría mejorar si el público desarrollara el gusto de las dimensiones múltiples. Un medio para lograr lo anterior es la difusión de exposiciones escritas (Abbott, 1952; Burger, 1983) o filmadas (Banchoff and Strauss Productions, 1979), o de relatos de ciencia ficción referentes a objetos de un mundo de cuatro dimensiones espaciales (hipercubos, hiperesferas, etc.). Para los apasionados del álgebra,

hay muy convincentes expresiones matemáticas de varias medidas del punto, línea, cuadrado, cubo e hipercubo; del punto, círculo, esfera e hiperesfera, y cosas semejantes, en espacios de dimensionalidades progresivas. Para los enamorados del arte, el imponente cuadro de Salvador Dalí *Crucifixión (Corpus hypercubus*) muestra al instrumento de la crucifixión como un hipercubo desdoblado en el espacio tridimensional.

La mecánica cuántica es suficiente para recrear el esquema general de la tabla de los elementos haciendo cómputos de los átomos uno por uno. También es posible reconstruir el esquema de la tabla de los elementos desde un punto de partida totalmente distinto: la dinámica de grupos. La dinámica de grupos exige prácticamente que una tabla de los elementos basada en la simetría se amplíe a mayores espacios. Cualquier persona un tanto familiarizada con las ideas de la física de partículas elementales reconocerá el paralelo entre esta línea de razonamiento y la que dio lugar a la construcción de las "tablas periódicas" de hadrones a partir de la "tabla periódica" de los tres quarks ligeros en simetría $SU(3)$ (Hefferlin, 1989a, pp. 557-561; Young y Freedman, 1996). La dinámica de grupos, mediante el empleo de representaciones *reductibles*, ha servido como base teórica de la clasificación molecular de la SAU (Hefferlin *et al*., 1984). El uso de representaciones *irreductibles* da por resultado que algunos compartimientos se llenen con superposiciones lineales de símbolos moleculares (Zhuvikin y Hefferlin, 1983; Hefferlin *et al*., 1984; Zhuvikin y Hefferlin, 1992, 1994; Carlson, Hefferlin y Zhuvikin, 1995; Carlson *et al*., 1996). La investigación actual se centra en cadenas de grupos que dan origen a símbolos moleculares individuales que ocupan cada compartimiento.

Problemas técnicos al cotejar el sistema periódico físico con los datos

El primer problema técnico se encuentra en cuanto se empieza a comprobar hasta qué grado un sistema periódico concuerda con los datos. El problema consiste en los errores asombrosamente grandes que suelen acompañar a los datos en artículos de publicaciones periódicas (a veces de hasta 20% en potenciales de disociación y 100% en fuerzas de osciladores de moléculas diatómicas). Los errores son mucho menos serios en tablas críticas de calidad.

Se ha encontrado un segundo problema técnico, relativo a la periodicidad, que es básico en los sistemas periódicos físicos. Tal periodicidad es acentuada en las moléculas del grupo principal (figuras XII.1 a XII.6). Una expectativa era que la periodicidad sería visible de modo similar en moléculas de metales de transición. Por ejemplo, el autor esperaba que las moléculas de metales de transición que poseen un átomo de Zn, Cd o Hg marcarían el final de un periodo teniendo potenciales de disociación bajos. Esta expectativa se cumplió (Hefferlin, 1989a, cap. 5). La expectativa de que las moléculas lantanoides que tienen un átomo de Lu se comportarían igual no se cumplió. Se ha encontrado incluso que la periodicidad del grupo principal observada en las especies diatómicas (figuras XII.1 a XII.6) se pierde ligeramente en las moléculas pesadas. Por ejemplo, mientras que NeN y NeO tienen magnitudes cercanas a cero, XeN y XeO tienen potenciales de disociación con magnitudes próximas al valor medio de todas las demás moléculas (Krasnov, 1979).

Problemas al usar el sistema periódico físico para predecir datos nuevos

Esta sección se ocupa de los problemas que surgen cuando se predicen datos nuevos por medio de sistemas físicos. El primer problema es que la comunidad científica (en general) confía en la capacidad de los teóricos cuánticos o los experimentadores para computar o medir, respectivamente, los datos necesarios con algún grado de precisión. Buena parte de la comunidad no se da cuenta de que ni teóricos ni experimentadores tienen el interés o los recursos que hacen falta para hacer el trabajo con suficiente rapidez. El segundo problema es que la comunidad científica considera en gran medida no confiables cualesquiera pronósticos semiempíricos (heurísticos). Un sector considerable de la comunidad no está al tanto de los muchos pronósticos acertados que se han hecho en este y otros campos de investigación. La experiencia del autor es que estos dos problemas de percepción son más graves en “Occidente” que en otras partes.

El tercer problema ha surgido al intentarse predicciones globales, y se debe a la relativa escasez de datos aun de especies neutras, en estado fundamental. Hay, por ejemplo, varios centenares de datos sobre muchas propiedades espectroscópicas y termodinámicas de moléculas diatómicas; poco más de la mitad sobre las propiedades análogas de moléculas triatómicas acíclicas (y muy pocos sobre las especies cíclicas). Hay todavía menos sobre moléculas tetraatómicas, y éstos deben distribuirse entre especies tetraatómicas que tienen varias formas estructurales isómeras. La fracción de moléculas sobre las cuales pueden encontrarse datos respecto de una forma estructural dada se vuelve imperceptiblemente pequeña cuando se va más allá de las moléculas tetraatómicas. Esta situación se debe al inmenso número de moléculas e isómeros de un número dado de átomos que pueden existir.

Parece, pues, que los sistemas periódicos físicos pueden usarse para hacer predicciones de grandes números de moléculas sólo en el caso de las diatómicas, las triatómicas acíclicas y quizá una u otra forma estructural de moléculas tetraatómicas. Esta limitación no se debe al método de construcción del sistema periódico, sino a la escasez de datos con los cuales establecer los mínimos cuadrados o la informática de redes neuronales.

Se ha aligerado en cierto modo este problema con coordenadas compactas, esto es, con el uso de funciones que combinan coordenadas. Por ejemplo, Kong ha graficado con gran éxito datos moleculares sobre los números totales de electrones de valencia. Otro ejemplo es el sistema tridimensional de la SAU de moléculas triatómicas acíclicas (Carlson *et al.*, 1997; Wohlers *et al.*, 1998), que usa ejes $(R_1R_2 + R_2R_3)$, $(C_1 + C_2 + C_3)$, y C_2, contrayendo así las coordenadas tanto de filas como de columnas y produciendo un sistema tridimensional a partir de una de seis dimensiones.

Todos los métodos de contracción de coordenadas dan por consecuencia que haya más de una molécula en una posición dada. Los datos tabulados de todas estas moléculas se combinan en cualquier análisis, y todas las predicciones hechas sobre ellas son idénticas. (Un precedente aparece en la tabla de los elementos, donde más de un isótopo

puede ocupar el compartimiento de un elemento.) Está claro que el uso de coordenadas compactas implica una pérdida de exactitud.

PERSPECTIVAS DE LOS SISTEMAS PERIÓDICOS QUÍMICOS DE MOLÉCULAS

La sección anterior se ocupó del problema de la escasez de datos y el uso de coordenadas compactas como medio para sortearlo. Existe una segunda clase de sistemas periódicos que va a donde están los datos en vez de esperar a recibirlos. Se trata de los sistemas periódicos "químicos", que incluyen sólo moléculas sobre las cuales el investigador tiene gran competencia técnica y una base de datos muy extensa. A continuación se presentan algunos sistemas periódicos químicos junto con las perspectivas que se prevén para ellos.

Tabla periódica de hidrocarburos aromáticos policíclicos de Dias, y sus perspectivas

De 1982 a la fecha Dias viene formulando tablas periódicas de hidrocarburos aromáticos policíclicos: bencenoides de sexteto (1982, 1994), un subconjunto de ellos llamado bencenoides de sexteto resonantes totales (1994), hidrocarburos fluoranoides y fluorantenoides (1992a) e hidrocarburos indacénicos (1992b). Ha creado tablas de especies adicionales y ha interrelacionado todas estas tablas periódicas (1996). Su trabajo ilustra cómo una clase tan restringida de moléculas puede tener una población enorme y muchos aspectos interesantes, incluidos conteos y topologías de isómeros (1991).

Es extraordinaria la acuciosidad de Dias para explorar estas especies en sus muchas publicaciones. Hay muy buenas perspectivas de que descubra más horizontes de gran valor.

Sistema periódico de grupos funcionales de Haas, y sus perspectivas

Haas publicó un sistema periódico de grupos funcionales (Haas, 1982, 1983, 1984). Este sistema es una imaginativa ampliación del principio del desplazamiento del hidrógeno de Grimm. Contiene, en principio, un número infinito de miembros de una clase limitada de moléculas (grupos funcionales perfluorados). Primero Haas sustituye cualquier haluro por el hidrógeno del principio del desplazamiento del hidrógeno de Grimm, de manera que este principio se vuelve el "principio del desplazamiento del elemento" y los grupos son "paraelementos". El proceso se puede iterar, dando origen a paraelementos cada vez más complicados. Haas repite luego todo el procedimiento empezando por átomos de las filas tres y sucesivas.

Las perspectivas de este sistema periódico ya se han realizado. Es fácil escribir fórmulas de paraelementos usando el sistema; Haas y su equipo, expertos de renombre mundial en compuestos perfluorados, han sintetizado los compuestos así propuestos.

La tabla hiperperiódica

Babáiev ha bosquejado un sistema periódico que incluye, en principio, todas las moléculas posibles del grupo principal, de números pares de electrones, y sus isómeros (Babáiev y Hefferlin, 1996). Se caracteriza por una periodicidad que no tiene nada que ver con la periodicidad atómica; de ahí el nombre "hiperperiódico".

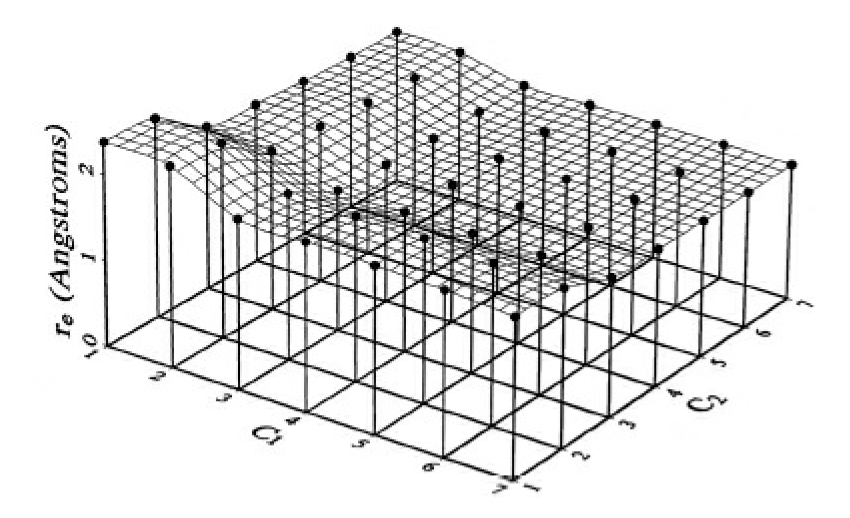


FIGURA XII.7. *Porción del sistema periódico de Babáiev. Cada compartimiento $\chi > 0$ contiene más de una molécula debido a que pueden incluirse especies que contienen hidrógeno y también ($\chi > 1$) debido al "cambio" de protones (p. ej., de Be_2 a LiC). Estas distintas especies podrían mostrarse si se dispusiera de dimensiones adicionales. No se muestran moléculas de números impares de electrones. Todas las entradas son del segundo periodo de la tabla de los elementos; podrían mostrarse entradas que incluyeran átomos de otros periodos si se recurriera a otras dimensiones adicionales. Se podrían mostrar varias clases de isómeros si se utilizaran aún más dimensiones. El borde de la derecha de esta tabla contiene especies situadas en el límite de la estabilidad; la adición de cualquier electrón produciría inestabilidad. Sin embargo, si se admiten átomos de periodos más altos, entonces algunas especies de característica de Euler >2 pueden ser estables. Algunas de ellas se mencionan en el texto. (Adaptado de Babáiev y Hefferlin, 1996.*)

La figura XII.7 muestra un esquema de esta tabla hiperperiódico. En la figura la tabla parece bidimensional. Tiene como eje vertical el número de átomos de no-hidrógeno y como eje horizontal un parámetro relacionado con las formas de las moléculas. La hiperperiodicidad se relaciona con estas formas moleculares, como se mostrará con ejemplos en la siguiente sección. La figura prefiere, al menos en las porciones superiores, moléculas de átomos de la fila dos.

Pueden existir muchas moléculas en un mismo compartimiento, aun si se mantiene la restricción a los átomos de la fila dos; por ejemplo, CO y BF están en el mismo compartimiento que N_2, y FNO_2, O_4 y N_2F_2 se encuentran en el mismo compartimiento

que BF_3. El esquema no muestra los ejes adicionales necesarios para distinguir entre estas moléculas horizontalmente isoelectrónicas; tales ejes se muestran de manera explícita en el glosario del sistema periódico de moléculas biatómicas de Kong. El esquema tampoco indica los ejes adicionales necesarios para separar moléculas verticalmente isoelectrónicas como O_2, SO, S_2, SeO,… Debe haber un número *N* de estos ejes adicionales para enumerar los periodos de los átomos de moléculas de una fila que contiene *N* átomos no de hidrógeno. Por último, el esquema carece de indicación de los ejes necesarios para resolver isómeros. La definición de estos ejes enumeradores de isómeros será extremadamente difícil.

Conviene empezar con la serie diagonal del flúor BeF_2, BF_3, CF_4, PF_5 y SF_6. Las tres primeras de estas especies proceden de átomos de la fila dos; la importancia de la desviación de las dos últimas se abordará después. Las formas están definidas por los pares de electrones solitarios de los átomos padres y por los ligandos de flúor. Son una línea, un triángulo, un tetraedro, una doble pirámide trigonal y un octaedro, respectivamente. Estas formas tienen uno, dos, tres y cuatro ciclos (que se determinan hallando el número mínimo de aristas que, al ser retiradas, eliminan todas las vías cíclicas a lo largo de las aristas). Se sigue que estas moléculas tienen características topológicas de Euler χ = –2, 0, 2, 4 y 6 (Babáiev y Hefferlin, 1996). El mismo resultado se sigue mirando a lo largo de la dirección horizontal. Los dos o tres últimos miembros de las hiperfilas que comienzan con tres de las moléculas mencionadas tienen especies de las mismas secuencias geométricas que ellas. Así, BeF_2, CF_2 (isoelectrónicas con FNO), SF_2 (isovalente con F_2O) y XeF_2 tienen formas que van de la línea a la doble pirámide trigonal; BF_3, NF_3 y ClF_3 tienen formas que van del triángulo a la doble pirámide trigonal, y CF_4, SF_4 y XeF_4 son de tetraedros a octaedros.

Corroboran lo anterior conjuntos de especies isoelectrónicas neutras de la misma fila: AlF_3, $SiOF_2$, PO_2F y SO_3 (χ = 0) son todas triángulos; SiF_4, POF_3, SO_2F_2 y ClO_3F (χ = 2) son todas tetraedros, etcétera.

Por último, una mirada a lo largo de la dirección vertical revela que todos los miembros de las hipercolumnas tienen las mismas formas. F_2O, NF_3 y CF_4 (χ = 2) son todas tetraedros; XeF_2, ClF_3, SF_4 y PF_5 (χ = 4) son todas dobles pirámides trigonales; XeF_4, IF_5 y SF_6 (χ = 6) son todas octaedros. Todas estas formas están definidas por los pares de electrones solitarios pertenecientes a los átomos padres, y por los ligandos. Así, queda claro que las hipercolumnas están definidas por las formas moleculares de la porción del sistema donde se encuentran estas especies.

Aunque hay un aumento constante del conteo de electrones de la capa de valencia a lo largo de cada hiperfila, el conteo varía en una hipercolumna. De hecho, aumenta en seis de una hiperfila a la siguiente. La razón de este cambio se explica en el siguiente párrafo. El aumento a lo largo de cada fila y el incremento de seis al avanzar hacia abajo por una columna de la figura confirman las posiciones de los átomos y iones (formas puntiagudas), los dímeros (formas lineales) y las especies situadas más a la izquierda en la tabla.

Cada compartimiento de la figura XII.7 muestra una sola entrada representativa. Sin embargo, también contiene otras moléculas del mismo número de átomos de no-hidrógeno (de la fila dos) y el mismo número de electrones de valencia. Por ejemplo, junto al Ne en χ = 2 están FH, OH_2, NH_3 y CH_4 (la última columna del diagrama del desplazamiento del hidrógeno de Grimm). Junto a F_2 están OFH, H_2O, NFH_2, CFH_3, NOH_3,… y C_2H_6. Y junto a F_2O están muchas moléculas cada vez de mayor número de

átomos de hidrógeno hasta C_3H_8, con la que termina la lista. Así, la molécula más hidrogenada de esta hipercolumna siempre es un alcano (C_nH_{2n+2}). Los alcanos tienen el mayor número posible de átomos de hidrógeno que pueden enlazarse con un número dado de átomos. La adición de uno más produce una especie inestable. De manera similar, las otras especies de un compartimiento $\chi = 2$ son tales que la sustitución de cualquier átomo de la fila dos con más electrones de valencia da por resultado una combinación inestable. Sin duda, hay moléculas estables en $\chi > 2$, pero contienen átomos de otros periodos y son resultado de consideraciones de enlace más complejas.

Las moléculas de los mayores números de átomos de hidrógeno en $\chi = 0$ son alquenos o alcanos acíclicos (C_nH_{2n}), p. ej., FNO y C_3H_6; las situadas en $\chi = -2$ son alquinos (C_nH_{2n-2}), p. ej., FN_3 y C_4H_6.

Las hipercolumnas implican mucho más de lo que se ha explicado hasta aquí (Babáiev, 1988; Babáiev y Hefferlin, 1996).

El sistema subsume otros sistemas periódicos de moléculas

El sistema periódico de Babáiev parece capaz de reproducir el sistema de Morozov (1907) cuando sólo los hidrocarburos, y sus derivados, se muestran en cada compartimiento (Babáiev y Hefferlin, 1996). Cabe hacer, entre paréntesis, una acotación de interés humano: Morozov creó su clasificación mientras se hallaba prisionero en la cárcel de la isla de Schlisselburg a causa de sus actividades políticas, tal como Kong realizó su trabajo creativo encontrándose bajo arresto domiciliario. El sistema de Babáiev da por resultado el sistema de Haas cuando las valencias de número impar se incluyen o sólo se muestran para-elementos.

Si la fila que contiene átomos se extendiera en dirección perpendicular al plano de la tabla, se enumerara con un eje para los periodos y se suministraran los elementos impares, se produciría la tabla de los elementos. Si la fila que contiene moléculas diatómicas se extiende dos veces en dirección perpendicular al plano de la tabla, se enumera con dos ejes independientes para los periodos y se introducen radicales, entonces surge el sistema periódico físico tetradimensional. La proliferación análoga de ejes para otras filas de la figura produciría sistemas periódicos de productos exteriores de estas moléculas de N átomos.

Este sistema hiperperiódico general podría elaborarse más. Aunque en principio es totalmente general, por el momento no tiene ningún fundamento grupo-dinámico ni de otro tipo, y tampoco un medio para iterar a moléculas mayores como el que es inherente al sistema periódico de Haas. Debería completarse mucho más y cotejarse con muchas propiedades atómicas y moleculares.

Emergencia

En las presentaciones hechas hasta aquí se ven dos hermosos ejemplos de emergencia: el incremento de los números de estructuras moleculares (isómeros) conforme aumenta N, y la aparición de la hiperperiodicidad.

Los diseñadores de estos esquemas tenían un conocimiento tan profundo de las moléculas de sus sistemas periódicos que, según refieren, no cotejaron los diseños con valores adicionales de la literatura. La predicción de datos nuevos no figura en sus publicaciones. Los sistemas periódicos, por lo general, se han presentado de forma bidimensional, aunque sean multidimensionales; esto es, no se intentó mostrar las dimensiones adicionales. Este estilo de presentación quizá se relacione con el hecho de que los diseñadores suelen ser químicos especializados en áreas que no requieren pensar en espacios multidimensionales.

La propia motivación y los métodos de construcción de los sistemas periódicos químicos garantizan que habrá datos, al menos, de algunas moléculas de muchos más que cuatro o cinco átomos. Por desgracia, a medida que aumenta el número de átomos de las moléculas, surge una insostenible escasez de datos en relación con el número de especies situadas en los compartimientos de cualquier sistema.

Este problema no se debe en absoluto a falta de esfuerzo en la medición o al tratamiento informático de los datos, puesto que el Chemical Abstracts Service ha descrito y registrado más de 20 millones de especies. Es difícil imaginar el esfuerzo dedicado a la obtención de esta inmensa cantidad de información, y la construcción de sistemas periódicos para organizar los datos no puede considerarse sino un homenaje a tal esfuerzo.

Semejanza molecular, química matemática y química combinatoria

Hay campos de actividad relacionados, como la búsqueda de semejanzas moleculares (Johnson y Maggiora, 1990) y de relaciones cuantitativas entre la estructura y las propiedades o la actividad moleculares, donde los conocimientos adquiridos de las clasificaciones moleculares basadas en la periodicidad podrían ser útiles.

Un objetivo de la química matemática es asociar un índice único a cada armazón de diagrama molecular (esto es, sin átomos de hidrógeno) (Balaban, 1973; King, 1977; Randić, 1992). El índice puede ser un número, un conjunto de números o una matriz. Desde entonces se han incluido el hidrógeno y otros átomos de diversas valencias y se han tratado estructuras tridimensionales o anudadas. Entre tanto, sin embargo, las técnicas de la química combinatoria se han acumulado con tal rapidez que presentan la perspectiva de adelantarse a los progresos hechos en la correlación de los datos a uno u otro índice, a menos que se produzca un avance radical en estos últimos.

En 1967 Sanderson publicó un libro de texto que contenía una tabla de los elementos única, así como tablas relacionadas de hidrógeno, nitrógeno, oxígeno, azufre, haluros y compuestos metílicos, etílicos y fenílicos. Shchukarev (1979, 1974) publicó veintenas de elaboradas gráficas de clases de moléculas (como óxidos de nitrógeno) que muestran cómo los valores de las propiedades moleculares dependen de alguna medida significativa (como el estado de oxidación del átomo de nitrógeno). Los esfuerzos dedicados a esta investigación en la Universidad Estatal de Leningrado son inimaginables y merecen más atención en Occidente (Latysheva y Hefferlin, 2004). El intento de estos autores por demostrar la periodicidad molecular es muy evidente. Es interesante que Mendeléiev, Morozov, Sanderson y Shchukarev hayan presentado sus conceptos de periodicidad molecular en libros de texto. Es de esperar que las tablas de Boldyrev y Simon o de Kong terminen por verse en las paredes de las aulas, en libros de texto y en tarjetas de bolsillo.

New Scientist (Rouvray, 1994), *Scientific American* (Scerri, 1998) y probablemente otras revistas destinadas al mismo público lector han publicado artículos que hacen alguna mención de los sistemas periódicos de moléculas. En el anuario de 1989 de la *Enciclopedia McGraw-Hill de Ciencia y Tecnología* aparece una breve sección que presenta algunos sistemas moleculares físicos (Hefferlin, 1989b), al igual que la *Macmillan Encyclopedia of Chemistry* (Scerri, 1997). Babáiev ha adaptado tablas y sistemas periódicos para programas de las televisiones rusa y británica.

Agradecimientos

El autor tiene una gran deuda de gratitud con el doctor Chris Hansen (SAU), el doctor Yevgueni Babáiev (Universidad Estatal de Moscú) y el doctor Gary Burdick (Andrews University) por su ayuda en la redacción de este capítulo o por ideas expresadas en él.

BIBLIOGRAFÍA

Abbott, E. A., *Flatland*, Dover Publications, Nueva York, 1952.

Allen, L. C., "Extension and Completion of the Periodic Table", *Journal of the American Chemical Society*, vol. 114, 1992, pp. 1510-1511.

Babáiev, Y. V., "Vozmozhna li periodicheskaya sistema molekul?", en A. P. Rudenko (ed.), *Istoria i metodologiya estestvennykh nauk*, vol. 35: *Filosofskie problemy khimii*, Universidad de Moscú, Moscú, 1988, pp. 121-140.

Babáiev, Y. V., y R. Hefferlin, "The Concepts of Periodicity and Hyperperiodicity: From Atoms to Molecules", en D. H. Rouvray y E. C. Kirby (eds.), *Concepts in Chemistry*, Research Studies Press Limited, Taunton, Reino Unido, 1996.

Balaban, A. T., "Chemical Graphs XVIII. Graphs of Degrees Four or Less, Isomers of Annulenes, and Nomenclature of Bridged Polycyclic Structures", *Revue Roumaine de Chimie*, vol. 18, núm. 4, 1973, pp. 635-653.

Banchoff and Strauss Productions, *The Hypercube: Projections and Slicing* [película], Providence, Rhode Island, 1979.

Barut, A. O., "On the Group Structure of the Periodic Table of the Elements", en B. Wybourne, *Structure of Matter* (Proceedings of the Rutherford Centennary Symposium, 1971), University of Canterbury Press, Cantorbery, 1972.

Boldyrev, A. I., N. Gonzales y J. Simons, "Periodicity and Peculiarity in 120 First- and Second-Row Diatomic Molecules", *Journal of Physical Chemistry*, vol. 98, núm. 40, 1994, pp. 9931-9944.

———, A. I., y J. Simons, *Periodic Table of Diatomic Molecules (Wall Charts A, B, and C)*, John Wiley & Sons, Hoboken, Nueva Jersey, 1997.

Burger, D., *Sphereland*, Barnes & Noble, Nueva York, 1983.

Campbell, J. A., *Chemical Systems: Energetics, Dynamics, Structure*, W. H. Freeman, Nueva York, 1970.

Carlson, C. M., R. J. Cavanaugh, G. V. Zhuvikin y R. A. Hefferlin, "Periodic Systems of Molecular States from the Boston Group Dynamics of $SO(3) \times SU(2)_S$", *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, vol. 36, núm. 3, 1996, pp. 396-398.

———, J. Gilkeson, J. K. Linderman, S. LeBlanc y R. Hefferlin, "Global Forecasting of Data Using Least-squares Methods and Molecular Databases: A Feasibility Study Using Triatomic Molecules", *Croatica Chemica Acta*, vol. 70, núm. 2, 1997, pp. 479-508.

———, R. Hefferlin y G. V. Zhuvikin, "Analysis of Group Theoretical Periodic Systems of Molecules Using Tabulated Data", *Joint Report No. 2*, Departamentos de Física del Southern College, Collegedale, Tennessee, y Universidad de San Petersburgo, San Petersburgo, 1995.

Clark, C. H. D., "The Periodic Groups of Non-hydride Di-atoms", *Transactions of the Faraday Society*, vol. 31, 1935, pp. 1017-1036.

Davis, W. B., y R. Hefferlin, "An Atlas of Forecasted Molecular Data ii: Vibration Frequencies of Main-Group and Transition-Metal Neutral Gas-Phase Diatomic Molecules in the Ground State" (en preparación).

Dias, J. R., "A Periodic Table of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. Isomer Enumeration of Fused Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. Part I", *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, vol. 22, núm. 1, 1982, pp. 15-22.

Dias, J. R. , "Benzenoid Series Having a Constant Number of Isomers. Part 3", *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, vol. 31, núm. 1, 1991, pp. 89-96.

———, "Studies in Deciphering the Information Content of Chemical Formulas: A Comprehensive Study of Fluorenes and Fluoranthenes", *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, vol. 32, núm. 1, 1992(a), pp. 2-11.

———, "Deciphering the Information Content of Chemical Formulas: Chemical and Structural Characteristics and Enumeration of Indacenes", *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, vol. 32, núm. 3, 1992(b), pp. 203-209.

———, "Setting the Benzenoids to Order", *Chemistry in Britain*, vol. 30, núm. 5, 1994, pp. 384-386.

———, "Formula Periodic Tables–Their Construction and Related Symmetries", *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, vol. 36, núm. 3, 1996, pp. 361-366.

Grimm, H. G., "On Construction and Sizes of Non-Metallic Hydrides", *Zeitschrift für Elektrochemie und angewandte physikalische Chemie*, vol. 31, 1925, pp. 474-480.

———, "Zur Systematik der chemischen Verbindungen vom Standpunkt der Atomforschung zugleich über einige Aufgaben der Experimentalchemie", *Naturwissenschaften*, vol. 17, núm. 28, 1929, pp. 557-564.

Haas, A., "A New Classification Principle: The Periodic System of Functional Groups", *Chemicker Zeitung*, vol. 106, núm. 6, 1982, pp. 239-248.

———, "Novyi printzip klassifikatzii funktzional'nykh grupp v svyazi c periodicheskoi sistemoi", *Zhurnal Vse-soyuznovo Khimicheskovo Obshchestva*, vol. 28, 1983, pp. 647-655.

———, "The Element Displacement Principle: A New Guide in P-block Element Chemistry", *Advances in Inorganic Chemistry and Radiochemistry*, vol. 28, 1984, pp. 167-202.

Hefferlin, R., *Periodic Systems and Their Relation to the Systematic Analysis of Molecular Data*, Edwin Mellen Press, Lewiston, Nueva York, 1989(a).

———, "Molecule", *McGraw-Hill Yearbook of Science and Technology*, 1989(b), pp. 224-228.

———, "Matrix-Product Periodic Systems of Molecules", *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, vol. 34, núm. 2, 1994, pp. 314-317.

———, y G. W. Burdick, "Fizicheskie i Khimicheskie Periodicheskie Sistemy Molekul", *Zhurnal Obshchei Khimii*, vol. 64, 1994, pp. 1870-1885. (Trad. al inglés, "Periodic Systems of Molecules: Physical and Chemical", *Russian Journal of General Chemistry*, vol. 64, 1994, pp. 1659-1674.)

———, R. Campbell, D. Gimbel, H. Kuhlman y T. Cayton, "The Periodic Table of Diatomic Molecules–I. An Algorithm for Retrieval and Prediction of Spectrophysical Properties", *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 21, núm. 4, 1979, pp. 315-336.

Hefferlin, R., W. B. Davis y J. Ileto, "An Atlas of Forecasted Molecular Data i: Internuclear Separations of Main-Group and Transition-Metal Neutral Gas-Phase Diatomic Molecules in the Ground State", *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, vol. 43, núm. 2, 2003, pp. 622-628.

———, y H. Kuhlman, "The Periodic System for Free Diatomic Molecules–III. Theoretical Articulation", *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 24, núm. 5, 1980, pp. 379-383.

———, G. V. Zhuvikin, K. E. Caviness y P. J. Duersken, "Periodic Systems of *N*-Atom Molecules", *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 32, núm. 4, 1984, pp. 257-268.

Jenč, F., "The Reduced Potential Curve (RPC) Method and Its Applications", *International Reviews in Physical Chemistry*, vol. 15, núm. 2, 1996, pp. 467-523.

Johnson, M. A., y G. M. Maggiora (eds.), *Concepts and Applications of Molecular Similarity*, John Wiley, Hoboken, Nueva Jersey, 1990.

Kaslin, V. M., *Tables of Force Constants k_e and Vibration Constants ω_e of Ground Electronic States of Diatomic Molecules, Composed of Atoms with Composition of s and p Shells (Atom from the Chemical Groups of Lithium, Beryllium, Boron and Carbon). Preprint 302*, Laboratorio de Óptica, Departamento de Óptica y Espectroscopía, Instituto de Física, Moscú, 1983(a).

———, *Tables of Force Constants k_e and Vibration Constants ω_e of Ground Electronic States of Diatomic Molecules, Composed of Atoms with Composition of s and p Shells (Atom from the Chemical Groups of Nitrogen, Oxygen, Fluorine, and Neon). Preprint 303*, Laboratorio de Óptica, Departamento de Óptica y Espectroscopía, Instituto de Física, Moscú, 1983(b).

———, "O svyazi spektroskopicheskikh konstant dvukhatomnykh molekul c parametrami atomov", *Optika i Spektroskopiya*, vol. 59, núm. 3, 1985, pp. 667-770 (texto y gráficas sin cuadros).

King, R. B., "The Elplacarnet Tree: A Complement to the Periodic Table for the Organometallic Chemist", *Journal of Chemistry*, vol. 15, 1977, pp. 181-188.

Komarov, V. S., y V. D. Lyakhovskii, "Unitarnaya Simmetriya Molekul", *Khimicheskaya Physica*, vol. 5, 1986, pp. 914-924. (Trad. al inglés, "Unitary Symmetry of Molecules", *Soviet Journal of Chemistry and Physics*, vol. 5, 1986, pp. 1501-1519.)

Kong, F. A., "The Periodicity of Diatomic Molecules", *Journal of Molecular Structure*, vol. 90, 1982, pp. 17-28.

———, "An Alternative Periodic Table for Triatomic Molecules", en R. Hefferlin, 1989(a), cap. 11.

Krasnov, K. S. (ed.), *Molekulyarnye postoyannye neorganicheskikh soedinenii*, Khimiya, Leningrado, 1979.

Latysheva, V. A., y R. Hefferlin, "Periodic Systems of Molecules as Elements of Shchukarev's 'Supermatrix', i. e. the Chemical Element Periodic System", *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, vol. 44, núm. 4, 2004, pp. 1202-1209.

Mazurs, E. G., *Graphic Representations of the Periodic System During One Hundred Years*, University of Alabama Press, Tuscaloosa, Alabama, 1974.

Morozov, N., *Stroeniya Veshchestva*, I. D. Sytina Publication, Moscú, 1907.

Randić, M., "Chemical Structure–What is She?", *Journal of Chemical Education*, vol. 69, núm. 9, 1992, pp. 713-718.

Rouvray, D., "Elementary, My Dear Mendeleyev", *New Scientist*, núm. 1912, 1994, pp. 36-39.

Rumer, Y. B., y A. I. Fet, "The Group Spin (4) and the Mendeleev System", *Theoretical and Mathematical Physics*, vol. 9, núm. 2, 1971, pp. 1081-1085.

Sanderson, R. T., *Inorganic Chemistry*, Reinhold, Nueva York, 1967.

Scerri, E., "Periodicity, Chemical", en J. J. Lagowski (ed.), *Macmillan Encyclopedia of Chemistry*, vol. 3, Simon & Schuster Macmillan, Nueva York, 1997, pp. 22-32.

———, "The Evolution of the Periodic System", *Scientific American*, vol. 279, núm. 3, 1998, pp. 56-61.

Shchukarev, S. A., *Neorganicheskaya Khimiya*, vol. 1, Vysshaya Shkola, Moscú, 1970.

———, *Neorganicheskaya Khimiya*, vol. 2, Vysshaya Shkola, Moscú, 1974.

Van Spronsen, J. W., *The Periodic System of Chemical Elements*, Elsevier, Amsterdam, 1969.

Wohlers, J., W. B. Laing, R. Hefferlin y W. B. Davis, "Least-Squares and Neural-Network Forecasting from Critical Data: Diatomic Molecular r_e and Triatomic ΔH_a and *IP*", en R. Carbo-Dorca y P. G. Mezey (eds.), *Advances in Molecular Similarity*, JAI Press, Stamford, Connecticut, 1998, pp. 265-287.

Young, H. D., y R. A. Freedman, *University Physics*, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1996.

Zhuvikin, G. V., y R. Hefferlin, "Periodicheskaya sistema dvukhatomnykh molekul: Teoretiko-gruppovoi podkhod", *Vestnik Leningradskovo Universiteta*, vol. 16, 1983, pp. 10-16.

———, y R Hefferlin, "Bosonic Symmetry and Periodic Systems of Molecules", en M. A. del Olmo, M. Santander y J. Mateos Guilarte (eds.), "Group Theoretical Methods in Physics", *Proceedings of the XIX International Colloquium (Salamanca, Spain, June 29-July 4, 1992), Anales de Física: Monografías*, núm. 1, vol. 2, Real Sociedad Española de Física, 1992, pp. 358-361.

Zhuvikin, G. V., y R. Hefferlin, "Symmetry Principles for Periodic Systems of Molecules", *Joint Report No. 1*, Departamentos de Física del Southern College, Collegedale, Tennessee, y Universidad de San Petersburgo, San Petersburgo, 1994.

---

[*] Southern Adventist University, Collegedale, Tennessee 37315, EUA.

XIII. UN NUEVO PARADIGMA PARA SCHRÖDINGER Y KOHN

JACK R. WOODYARD*

INTRODUCCIÓN

Una alternativa al espacio de Hilbert en la mecánica cuántica no relativista devuelve a Schrödinger sus “ondas de materia” y supera la “prueba del pato”[1] de las ecuaciones de Kohn y Sham. Según Wylie (1999), “no se puede dar por sentado que las ciencias presuponen un mundo ordenado, que están unidas por el objetivo de describir y explicar de manera sistemática este orden, ni que se valen de metodologías netamente científicas que, bien aplicadas, producen resultados específicos por campo, los cuales convergen en un solo sistema coherente y abarcador de conocimiento”. El descubrimiento es casi siempre caótico. El desarrollo de una nueva visión, sobre todo que comunique conceptos entre la química y la física, con posibles aplicaciones en biología y medicina, despierta escepticismo no sólo en la comunidad científica, sino en el propio creador del avance. Debe haber alguna fuerza motivadora que haga valer la pena el esfuerzo. Una mirada a la literatura y a conversaciones tanto con filósofos como con científicos muestra que las cosas no están tan bien como quisiéramos creer (Tegmark y Wheeler, 2001). Aun desde el punto de vista técnico es posible mostrar que los cálculos químico-cuánticos convergen en respuestas que a menudo se apartan insatisfactoriamente de los valores experimentales, y que las supuestas mejoras en realidad empeoran la situación (Feller y Peterson, 1998). Muchos temas básicos de la enseñanza, sobre todo a estudiantes universitarios no científicos, son tan ilógicos como ineficaces, y ponen en entredicho las prácticas vigentes. Un punto central del asunto es: lo que realmente constituye una “explicación”. Lo que se discute es “¿Cómo afecta la interpretación al uso y los resultados de las observaciones o los cálculos científicos?” El asunto concluye con la aseveración: “La mecánica cuántica es no intuitiva” (Pesic, 2002). ¿Por qué? ¿Puede un nuevo método hacer algo al respecto? Una revisión del trabajo original y el primer desarrollo de la mecánica cuántica en este caso, y de sus aplicaciones tanto a la física como a la química, muestra algunos supuestos, cómo el conocimiento vigente los desplaza y la resistencia natural a reconocer tal desplazamiento.[2] En particular, algunas modificaciones muy simples a la obra de Schrödinger permiten una intuitividad mucho mayor y posibilitan la visualización de los sistemas atómicos y moleculares. Para esta exposición son necesarios algunos resultados matemáticos específicos de validez general, como lo es la discusión del uso del espacio de Hilbert en problemas atómicos y moleculares. Una vez que se entiende el método tradicional, es posible abordar la nueva visión, en la que el espacio de Hilbert ya no es útil, y las ecuaciones pertinentes y sus soluciones se conservan en el espacio tridimensional complejo. El electrón, el protón, de hecho todas las “partículas” con carga, se describen como ondas al principio, y se elige un arquetipo particular para armonizar la teoría con la experimentación. Las interacciones pertinentes se consideran la interferencia espectral de estas ondas. Los resultados se asocian con métodos tradicionales, incluida la teoría del funcional de la densidad,[3, 4] y muestran eficacia tanto calculatoria como descriptiva. Se ofrecen ejemplos de un estudio preliminar de factibilidad, y se comparan con los resultados de un reciente cálculo. La teoría completa parece sólida por lo que toca a la eficiencia calculatoria —los valores

tienen un error estándar de 0.0009% con respecto al valor experimental[5] de los sistemas, probados mediante el uso de una sola configuración y cero iteraciones—, y el trabajo tiene congruencia interna.[6] Este capítulo debe arrojar luz sobre los problemas asociados con el desarrollo de una nueva teoría que cuestiona el dogma vigente, e ilustrar algunas de las contorsiones necesarias para hacerla funcionar. Por desgracia, la aceptación de la comunidad científica depende de factores no necesariamente asociados con la pertinencia de la lógica o el valor de los resultados, los cuales constituyen retos para el desarrollo de una filosofía coherente de la química o de cualquier otra ciencia. Algunos de esos factores se exponen en el presente trabajo.

Según la leyenda, Max Planck dijo una vez que las ideas nuevas no ganan aceptación; lo que ocurre es que sus oponentes se van muriendo. Quienquiera que ha tratado de hacer algo nuevo ha sufrido experiencias como que un crítico declare: “La teoría de la estructura electrónica es un campo maduro y no necesita teorías ingenuas”. Aun así, una breve revisión de la literatura muestra que esta declaración en particular es, a lo sumo, miope.[7] El innovador puede incluso encontrarse con que un científico supuestamente competente, mirándolo a los ojos, se niegue a mirar siquiera sus números, por muchos méritos académicos que tenga. Todo esto es parte del empeño muy humano y social que llamamos ciencia (Shermer, 2001). De igual interés, sin embargo, es el diálogo interno de la misma índole. Uno está empapado del conocimiento del momento. A menudo este conocimiento es inconsecuente, pero parece consecuente hasta que se analiza a fondo. Cosas pequeñas se interponen en el camino; hay que someter a pruebas decisivas y erradicar comentarios de viejos profesores, declaraciones equivocadas, errores de viejos libros. En el mejor de los casos el progreso es lento y está lleno de titubeos y posibles errores. Cada nueva revelación debe someterse a prueba una y otra vez. Si el método es preciso y eficaz, como evidencian los cuadros XIII.1 y XIII.2,[8] así como el poder explicativo del método, cabría esperar que con el tiempo se reconozca y se use. La historia indica que esto podría ocurrir por medio de los esfuerzos perseverantes del autor, o que quizá no ocurra hasta que un especialista provisto de las influencias políticas necesarias vuelva a proponerlo. Un motivo de preocupación, no obstante, es la era tecnológica en que vivimos. Hoy en día se logran muchos resultados aplicando simplemente la monstruosa capacidad de las computadoras modernas. La elegancia de una teoría nueva puede perderse en la confusión de los números. En suma, se trata más de una aventura que de una expedición científica.

CUADRO XIII.1. *Estudios de factibilidad con modelos simplificados*

Aproximación cristalográfica. Disponer el sistema atómico o molecular de modo que los electrones estén a la mayor distancia posible que permita la presencia de los núcleos. Las cargas nucleares efectivas se determinaron usando el teorema de virial. Los valores experimentales son de las tablas de Moore o de la literatura. Estos valores se obtuvieron para una configuración y cero iteraciones.

Ión	*Calc.*	*Exp.*	*Ión*	*Calc.*	*Exp.*	*Ión*	*Calc.*	*Exp.*
H^-	−0.5174	−0.5277	He-I	−2.8797	−2.9049	Li-II	−7.1976	−7.2837
Be-III	−13.4962	−13.6637	B-IV	−21.7838	−22.0463	C-V	−32.0643	−32.4329
N-VI	−44.3400	−44.8248	O-VII	−58.6119	−59.2228			

Aproximación de la teoría del funcional de la densidad restringida. Restringir las funciones de un electrón a la superposición del Φs y determinar una carga nuclear efectiva de los núcleos por medio de la integral S. Los casos de prueba se prepararon con una configuración y cero iteraciones.

Ión	*% de exp.*	*Ión*	*% de exp.*	*Ión*	*% de exp.*	*Ión*	*% de exp.*	*Ión*	*% de exp.*
H^-	99.34	He-I	102.13	Li-II	102.99	Be-III	102.47	B-IV	102.06
C-V	101.75	N-VI	101.51	O-VII	101.31				

Aproximación de restricciones no holonómicas. Eliminar la interacción electrón-electrón del hamiltoniano y remplazarla con un conjunto de ecuaciones de Schrödinger unidimensionales que modelicen el libre "movimiento" que se permite a los electrones en la aproximación cristalográfica. Cuantizar este movimiento proporciona una "energía de punto cero" que se aproxima a la energía del sistema. Las pruebas se prepararon para casos de átomos de dos y tres electrones en estados fundamentales y excitados, moléculas biatómicas y cristales simples. Los datos que aparecen a continuación corresponden a una configuración y cero iteraciones. El número atómico se usa como carga nuclear efectiva. Los iones designados con un asterisco seguido de un número se encuentran en estados excitados, p. ej., *1 = primer estado excitado.

Energía (atómica)

Ión	*% de exp.*	*Ión*	*% de exp.*	*Ión*	*% de exp.*	*Ión*	*% de exp.*	*Ión*	*% de exp.*
H^-	100.4	He-I	103.4	Li-II	102.8	Be-III	102.5	B-IV	102.1
C-V	101.9	N-VI	101.6	O-VII	101.5	Li-I	101.1	He-I*1	101.2
Li-II*1	101.3	Be-III*1	101.1	B-IV*1	100.9	C-V*1	100.8	N-VI*1	100.6
O-VII*1	100.5	He-I*2	101.9	He-I*3	100.1	Li-II*3	101.2	Be-III*3	101.3
B-IV*3	101.2	C-V*3	101.1	N-VI*3	101.0	O-VII*3	100.9		

Radios iónicos medios (cálculos preliminares, cores *congelados*)

Ión	*% de exp.*	*Ión*	*% de exp.*	*Ión*	*% de exp.*	*Ión*	*% de exp.*	*Ión*	*% de exp.*
H^-	101	He-I	108	Li-II	107	C-V	97	N-VI	99

Longitudes de enlace (sistemas biatómicos seleccionados, cálculos preliminares)

Molécula	*% de exp.*	*Molécula*	*% de exp.*	*Molécula*	*% de exp.*
H_2	106	Li_2	99.5	LiH	110

En la siguiente prueba las cargas nucleares efectivas se determinaron para el método de restricciones no holonómicas usando el teorema de virial.

Energía (atómica)

Ión	*% de exp.*	*Ión*	*% de exp.*	*Ión*	*% de exp.*	*Ión*	*% de exp.*	*Ión*	*% de exp.*
H^-	100.4	He-I	101.1	Li-II	101.7	Be-III	101.7	B-IV	101.5
C-V	101.4	N-VI	101.3	O-VII	101.2				

Para un cálculo avanzado de la molécula de hidrógeno, $E = 1.0024\ E_{exp}$; $\delta = 0.9838\ \delta_{exp}$; *donde δ es la separación nuclear media*. Se predijeron correctamente estructuras cristalinas para LiH, hidrógeno metálico y helio cristalino usando las distribuciones de cargas medias calculadas con este método. Las estructuras moleculares del bióxido de carbono y el agua, y la diferencia de densidad aproximada entre el agua líquida y el hielo, también se predijeron correctamente. (Los modelos de la distribución de cargas y el valor medio de $r(\theta, \Phi)$ se construyeron con arcilla de modelar y se ensamblaron como piezas de un rompecabezas tridimensional para hacer estas predicciones. Un análisis completo requeriría que se relajara la energía como función de la geometría.)

Autores como Wylie (1999) y Cartwright (1999) señalan los límites de la empresa científica moderna, pero los científicos que trabajan tienden a quedar atrapados en el sistema. Es muy fácil seguir los conceptos de una disciplina como la química cuántica *pro forma*, sin hacerse demasiados cuestionamientos en la prisa por conseguir un decimal más en la respuesta prevista, o el próximo subsidio cuantioso del gobierno o la industria. La mecánica cuántica ha sido una herramienta poderosa durante muchos años, pero todavía queda mucho por explorar y examinar.[9] *1*) Desde el punto de vista puramente calculatorio, es del todo posible mejorar la teoría, aumentar el número de términos de la solución de series y obtener una respuesta menos correcta.[10] *2*) Podemos calcular bastante bien el enlace químico, pero seguimos sin saber exactamente lo que es (Scerri, 1994). En realidad no podemos explicarlo muy bien, salvo como procedimiento calculatorio. *3*) La tabla periódica parece apoyar a la mecánica cuántica, pero para determinar una configuración se deben calcular todas las configuraciones posibles y elegir la de mínima energía (Scerri, 1997; 1998a, 1998b, 1998c). Con frecuencia nuestros cálculos no son muy precisos, y elementos como el cromo siguen siendo un misterio. *4*) Tenemos dificultad incluso para explicar cómo elementos como el carbono pueden tener tantos estados de valencia, cuando muchos de los electrones de valencia son pares. *5*) La predicción de la estructura cristalina, los ángulos de enlace o la energía de moléculas, vidrios u otros materiales requiere el cálculo de todas las estructuras posibles y tomar la de mínima energía. *6*) Principios simples, como el principio de exclusión de Pauli, la regla de Hundt y la dualidad de onda y partícula, son leyes de la naturaleza. *7*) Desde otra perspectiva, los filósofos se preguntan unos a otros por qué enseñamos los orbitales (Scerri, 1991). Después de todo, éstos no tienen significado físico y, en todos los casos menos en el del hidrógeno, existen sólo en un espacio multidimensional de Hilbert. *8*) No hay manera de visualizar la estructura atómica o siquiera la distribución de las cargas en torno de un átomo o grupo de átomos sin entrar en cálculos muy problemáticos. *9*) Lo más próximo a un método intuitivo es la teoría del funcional de la densidad, y se funda en dos importantes errores (Dreizler y Gross, 1990): *a*) la inferencia sólo es válida en el estado fundamental: los estados excitados son una solución improvisada (Nagy y Adachi, 2000); *b*) existen sólo potenciales modelo de la energía de intercambio-correlación: no hay un método *a priori* para determinar este potencial.

El actual estado de cosas es hasta cierto punto un accidente histórico. Schrödinger y Einstein habrían querido algo más amable que aquello que con el tiempo evolucionaría hasta convertirse en la mecánica cuántica que conocemos hoy (Scott, 1967). Schrödinger quería ondas de materia y obtuvo funciones de onda.[11] En una demostración de prueba por intimidación, Bohr y sus amigos impusieron con bastante éxito la representación del espacio de Hilbert.[12] Se debatía entonces cómo combinar funciones de onda hidrogenoides para representar átomos polielectrónicos. Los intentos de Schrödinger de una simple superposición no dieron resultado. La forma del término de interacción electrón-electrón parecía dictar que las funciones de onda de electrones

individuales deberían combinarse en forma de producto. Todo esto, desde luego, evolucionó hasta convertirse en el hoy conocido esquema de configuración-interacción de funciones de onda de producto totalmente antisimétrico. Una de las cosas verdaderamente ásperas al respecto es que el espacio de Hilbert es muy extraño. Cada electrón existe en su propio espacio tridimensional, de manera independiente, y todos estos espacios tridimensionales, con el espín, están superpuestos. Lo único que puede remediar la situación es el operador electrón-electrón, que comunica los “huecos” existentes en estos espacios superpuestos. Cabe hacer notar también que, como está escrito en la ecuación de Schrödinger, el electrón es una partícula hasta que se resuelve la ecuación. No es hasta entonces cuando puede manifestarse parte de la naturaleza de la onda. La vieja cuestión de la dualidad de onda y partícula es un misterio, y “la mecánica cuántica es no intuitiva”.

Este capítulo adopta el enfoque según el cual las “partículas” cargadas son en realidad ondas en un espacio tridimensional complejo, y reescribe la ecuación de Schrödinger para admitir esta idea. La magnitud cuadrada de estas ondas, incluida su interferencia espectral, proporciona las distribuciones de cargas medias, positivas y negativas del sistema. Se presentan resultados de alta calidad de cálculos desarrollados a partir de una sola configuración y cero iteraciones, y se explican muchos fenómenos como resultados del concepto de interferencia de electrones. Se usan unidades atómicas de D. Hartree de principio a fin (véase Bethe y Salpeter, 1957).

LA LOCURA DE SCHRÖDINGER[13]

Schrödinger construyó su ecuación de onda de forma no relativista, pero también incorporó directamente a la mezcla la ley de Coulomb: la forma funcional de la energía potencial entre el electrón y el núcleo, entre núcleos o entre electrones es exactamente la ley de Coulomb de dos partículas puntuales. No había garantía alguna de que iba a funcionar, salvo el gran éxito de los cálculos de sistemas atómicos monoelectrónicos. Acaso la sorpresa hubiera entrado en los cálculos electrón-electrón.

Sin que Schrödinger lo supiera, se impone una singularidad cuando las funciones monoelectrónicas se superponen de manera concéntrica. Si las funciones monoelectrónicas se tratan como ondas estacionarias con centros desplazados unos de otros por una cantidad ε (véase la figura XIII.1), y la magnitud cuadrada de la interferencia espectral resultante se toma como la cantidad física, entonces el resultado como $\varepsilon \to 0$ no necesariamente equivale al resultado en $\varepsilon = 0$. Esto tuvo un efecto muy destructivo en sus cálculos.

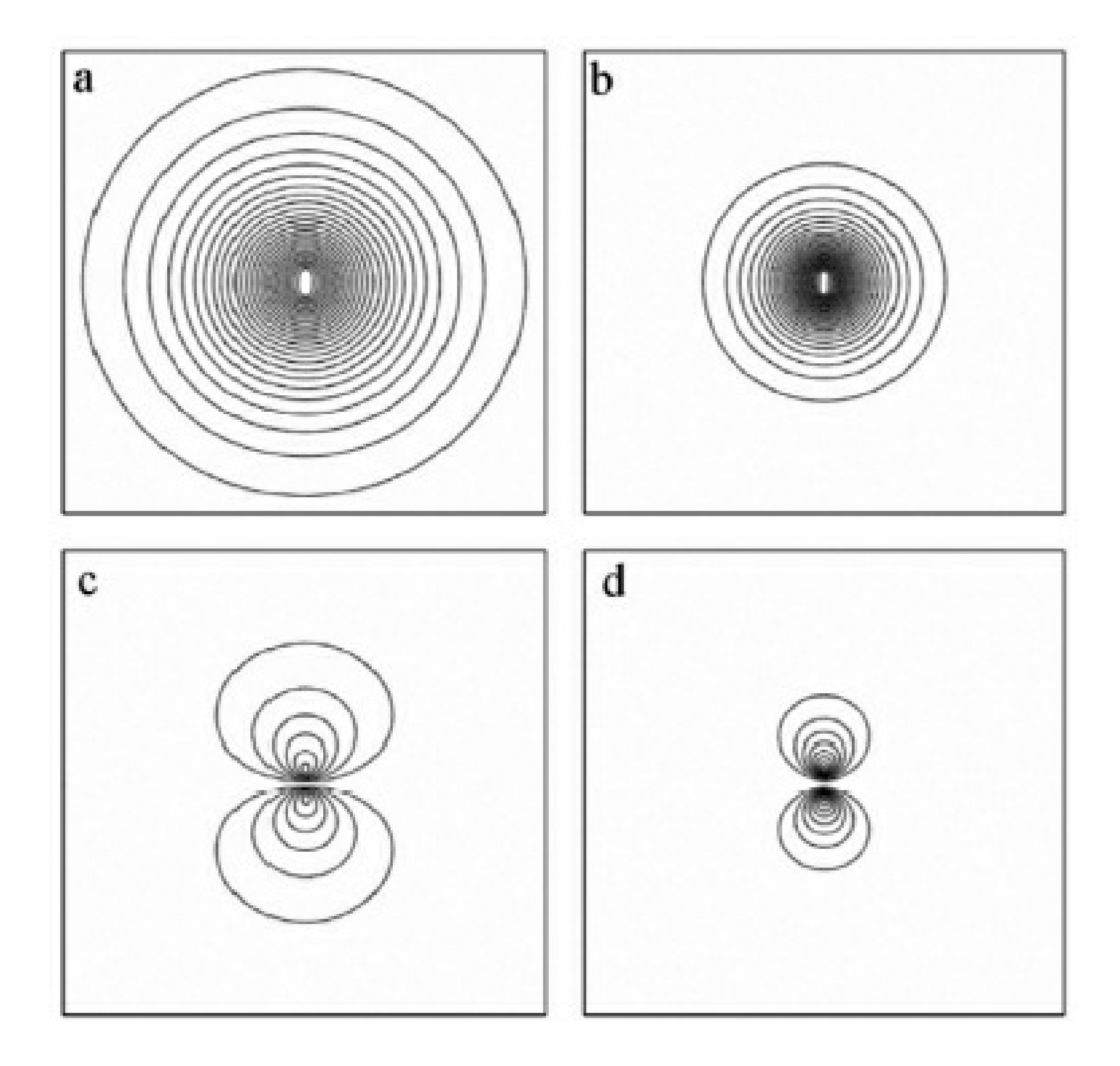


FIGURA XIII.1. *Funciones monoelectrónicas separadas por 0.4 unidades de Hartree, superpuestas para representar dos electrones en un sistema atómico*: a) *onda electrónica* $1s^2\ 1S^0$; b) *distribución de cargas* $1s^{2\ 1}S_0$; c) *onda electrónica* $1s^{2\ 3}P$; d) *distribución de carga* $1s^{2\ 3}P$. *Las gráficas se representan en sección transversal x–z y miden 4 unidades de Hartree por lado*.

La figura XIII.1 es una gráfica de contorno calculada de dos electrones 1s interactuantes. Los centros de masa están distribuidos simétricamente en torno del núcleo, situado en el centro. Hemos elegido un desplazamiento de los centros de masa de 0.4 unidades de Hartree para efectos de claridad. Mostramos primero la función de onda de ensayo Ψ, esto es, la resultante de nuestro modelo, en los segmentos *a* y *c*. El segmento *a* corresponde a electrones apareados, y el segmento *c*, a electrones desapareados. Mostramos luego la magnitud cuadrada Ψ*Ψ, que designamos distribución de cargas. Una vez más, el segmento *b* corresponde a electrones apareados, y el segmento *d*, a electrones desapareados. Cabe advertir que en el segmento *b*, aun con una separación de 0.4 unidades de Hartree, las ondas de los dos electrones se han fusionado en una onda distintiva. Es el bosón de espín cero famoso por su superconductividad. Nótese cómo en el segmento *c* las ondas de los dos electrones parecen empujarse unas a otras. Este efecto aparece aún más acentuado en el segmento *d*, la distribución de cargas desapareadas. Lo anterior causa un marcado aumento de la energía calculada, aunque el parámetro del rango se tome como nada más que el número atómico. Tales sistemas atómicos no pueden existir. Los dos electrones pueden coexistir en un sistema con límites matemáticos sólo si la cantidad ε es muy grande, o en asociación separada con múltiples núcleos.

Otra cuestión que no era de esperar fue que Schrödinger supiera que estas mismas funciones monoelectrónicas deben cambiar sus radios medios conforme se aproximan entre sí. Así lo requiere el teorema de virial,[14] y la condición se relaciona con la propagación del paquete de ondas. De hecho, se descubre una tendencia general de las ondas monoelectrónicas a comprimirse conforme se acercan a un núcleo, por lo que la propagación normalmente esperada del paquete de ondas se invierte, al menos en los sistemas con límites matemáticos.

Los precursores y desarrolladores de la teoría del funcional de la densidad se encontraron todavía con otro problema: la autointeracción (Dreizler y Gross, 1990). Se desarrollaron con mucho éxito procedimientos de corrección especializados que son de uso corriente en todos los cálculos modernos. En nuestro caso, una vez más, a causa de la índole ampliada de nuestra representación de la "partícula" cargada, hay una posible dificultad en lo que puede considerarse autointerferencia, la cual es preciso examinar. Las correcciones de auto-interferencia potencial siempre son finitas, y por lo general pequeñas, lo que constituye una gran ventaja con respecto a la situación que existe en la electrodinámica cuántica.

Armados con esta información, estamos casi listos para reconstruir la mecánica cuántica. Antes cabe advertir, sin embargo, que mientras que los intentos de Schrödinger fueron en vano, Hyllaras logró calcular bastante bien sistemas atómicos bielectrónicos sin

recurrir al espacio de Hilbert.[15] En otro orden de cosas, hay alguna base para abordar el electrón como onda y no como partícula o, al menos, como cuerpo alargado. Fermi lo hizo en los albores del desarrollo de la electrodinámica cuántica (Schweber, 2002),[16] y la teoría de las cuerdas (Woit, 2002) ha abordado el asunto desde una óptica parecida en tiempos más recientes. Nuestro plan es reescribir la ecuación de Schrödinger desde el punto de vista del electrón y el protón en cuanto ondas estacionarias y no como partículas puntuales. Aunque terminaremos con una ecuación integral en vez de diferencial, y algunos cambios necesarios de interpretación, el efecto es muy parecido al del simple uso de una función de ensayo no convencional. Esta función de ensayo esta contenida por entero en el espacio tridimensional complejo, y adopta la interesante forma de una "suma totalmente antisimétrica" de ondas monoelectrónicas no concéntricas. Por fortuna, la enorme diferencia de masa entre el núcleo y el electrón hace del núcleo, en efecto, una fuente puntual.

El teorema de virial

El teorema de virial, un poderoso hallazgo que tiene validez tanto en la mecánica clásica como en la cuántica, se utiliza extraordinariamente poco. Establece la relación entre la energía cinética promediada en espacio y tiempo, y el virial de cualquier sistema con límites matemáticos. El virial está relacionado con el producto puntual entre el vector del radio y el gradiente de la energía potencial. Así, sólo en un campo central, la energía potencial es de –2 por la energía cinética. En todos los demás sistemas el virial es mucho mas complicado. La inferencia del teorema del virial es muy general, y en mecánica cuántica adopta la forma de un análisis del conmutador entre el hamiltoniano y la forma simétrica del vector de radio puntuado con el operador del momento de cada partícula una vez promediado en tiempo y espacio. El teorema de virial se aplica a cosas tan diversas como el movimiento planetario, un cúmulo de fermiones, y condensados de Bose-Einstein, siempre y cuando el sistema tenga límites matemáticos. Usaremos el teorema de virial para sondear la validez de la ley de Coulomb entre un protón y un electrón en dimensiones subatómicas al abordar las cantidades en la mecánica cuántica. Esto es necesario porque los únicos valores medibles son los valores medios de las variables dinámicas. También usaremos el teorema de virial para determinar el parámetro, llamado parámetro del rango, que define el radio medio de la onda del electrón o del protón.

Usando los postulados de Schrödinger, el operador hamiltoniano, H, de cada átomo del sistema puede escribirse como sigue:

$$H = T + V = \left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \nabla_i^2 \right] + \left[-\sum_{i=1}^{n} \frac{Z}{r_i} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^{n} \frac{1}{r_{ij}} \right] \qquad (1)$$

donde T es el operador de energía cinética asociado con el término que contiene la suma de los laplacianos, y V es el operador de energía potencial asociado con el segundo término. El segundo término se separa aún más en la energía potencial (negativa) de interacción entre el núcleo y cada electrón, y la energía potencial (positiva) de interacción entre los electrones, por pares. Hay "n" electrones en el sistema. El operador hamiltoniano total de, p. ej., una molécula, es la suma de todos los hamiltonianos atómicos más las formas correspondientes de las interacciones núcleo-núcleo y las energías cinéticas nucleares. Para formar la ecuación de Schrödinger, este operador hamiltoniano se aplica a una función de onda de ensayo, Ψ, y se establece igual al operador de energía aplicado a la misma función de onda de ensayo. En el caso de átomos y moléculas estables, este resultado no es sino una energía propia por la misma función de onda si se ha hallado la solución. Tradicionalmente, Ψ es la suma de funciones de onda en forma de productos totalmente antisimétricos y reside en el espacio de Hilbert. Esto significa que cada uno de los laplacianos es efectivo sólo en su propio subespacio i-ésimo. Esto es,

$$\nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \qquad (2)$$

en coordenadas cartesianas. Si conservamos la ecuación de Schrödinger en el espacio tridimensional complejo, junto con su función de ensayo Ψ, el significado es enteramente distinto. Hay un solo laplaciano en tal sistema, y es invariante en todo el espacio. Los términos ∇_i^2 no representan sino un cambio de la posición del origen, y la ecuación de Schrödinger puede escribirse así:

$$\left[-\frac{n}{2} \nabla^2 \Psi \right] + \left[-\sum_{i=1}^{n} \frac{Z}{r_i} + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^{n} \frac{1}{r_{ij}} \right] \Psi = E\Psi \qquad (3)$$

donde el valor propio del sistema es E. La forma propia de Ψ ya no implica el producto de funciones monoelectrónicas.

Para ser útil considerando ondas a electrones y protones, el hamiltoniano de la

ecuación (3) debe integrarse a todo el espacio para formar la energía media y la forma ampliada de la ecuación de Schrödinger.

Bastaría cualquier conjunto completo de funciones tridimensionales complejas para representar las ondas de carga, pero se requieren ciertas condiciones de contorno: *1*) necesitamos que la onda se extienda a través de todo el espacio, pero que tenga un radio medio finito; *2*) necesitamos que la onda se comporte como partícula en determinadas circunstancias y como onda en otras; *3*) necesitamos la interacción apropiada entre ondas en forma de interferencia espectral, y *4*) las ondas tienen que existir en el espacio tridimensional complejo con la magnitud cuadrada representativa de alguna realidad física. En breve, necesitamos que la representación sea fiel a nuestro conocimiento experimental. Según nuestra teoría, somos libres de elegir lo que mejor funcione, siempre y cuando tenga coherencia interna y concuerde con la naturaleza. Cualquier teoría tendrá determinado alcance de validez. Sólo aspiramos a que el alcance de validez sea lo mayor posible.

Elegimos como arquetipo la función monoelectrónica de Schrödinger, ψ. Usando la fase de Condon y Shortley (1967), esto se expresa, de manera un tanto modificada, así:

$$\mu\psi_{n,\ell,m_l} = \mu\frac{-(n-\ell-1)!}{(n+\ell)!^{\frac{3}{2}}(2n)^{\frac{1}{2}}}\left(\frac{2m\beta}{n}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m\beta r}{n}}\left(\frac{2m\beta r}{n}\right)L_{n+\ell}^{2\ell+1}\left(\frac{2m\beta r}{n}\right)Y_{\ell}^{m}(\theta,\phi) \quad (4)$$

En la ecuación (4) hemos sido un poco audaces. Multiplicamos la parte espacial, ψ, no por el espín, sino por el producto del espín por el momento magnético, μ. También hemos incluido la masa de la "partícula", m, aunque usamos unidades de Hartree. Esto se debe a que también queremos representar al protón, o núcleo, con este mismo esquema. El factor μ ayuda a relacionar la interacción magnética entre el núcleo y el electrón en la magnitud correcta. Con excepción de β, que requiere más explicación, el resto de la expresión es convencional, como se encuentra en Bethe y Salpeter (1957), donde L es el polinomio asociado de Laguerre, y Y, el armónico esférico. El cofactor β normalmente se asocia con la carga nuclear en el sistema atómico monoelectrónico o, en las teorías que emplean tamizado, es la carga nuclear efectiva. Queremos representar electrones o núcleos independientes, por lo que esta asociación no es apropiada. Llamaremos a β el parámetro del rango, ya que sirve primordialmente para determinar el radio medio de la onda.

Hay que admitir que cualquier "partícula" representada por este arquetipo no se encontrará, en general, en un estado específico. Por consiguiente, la onda de carga real será una suma infinita que comprende el conjunto completo de ψ, pero con el mismo momento magnético de espín. Esta suma superpondrá los valores ψ concéntricamente, ya que éstos representan sólo una carga. Las condiciones de contorno determinan los pesos de los diversos componentes.

Para ser útil, la función de ensayo Ψ debe formarse de un modo particular a fin de reproducir fielmente el conocimiento experimental. Las ondas interfieren o bien sumando o bien sustrayendo, lo que se traduce como interferencia constructiva o destructiva, pero tenemos algunos requerimientos específicos. Como es bien sabido experimentalmente, y como lo dice Pauli de manera expresa, no existen sistemas atómicos en los que dos electrones tengan los mismos números cuánticos. Para modelizar esto con las ondas de interferencia, debemos requerir que la resultante, Ψ, de ondas de dos electrones, ψ_1 y ψ_2, adopten la forma

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{\gamma}}(\psi_1 - o\psi_2) \tag{5}$$

donde γ es un factor de normalización, y o es el signo del producto de los espines de los electrones. Esta forma es antisimétrica bajo intercambio de índices, como lo requiere el principio de exclusión de Pauli. Si la cantidad de significado físico es la magnitud cuadrada, Ψ*Ψ, entonces habrá términos cruzados. En el caso de que haya electrones apareados y los mismos números cuánticos espaciales, pero espines antiparalelos, los términos cruzados son positivos y aumentan la magnitud cuadrada entre las dos cargas. En el caso de que todos los números cuánticos sean iguales, los términos cruzados garantizan la desaparición de la magnitud cuadrada en el punto medio entre los centros de ψ_1 y ψ_2. Si los electrones están apareados, la interferencia es constructiva. Si los electrones están desapareados, la interferencia es destructiva. La figura XIII.1 da un ejemplo de dos electrones 1s. En todos los casos distintos al de electrones apareados o desapareados, la interferencia es una mezcla de interferencia constructiva y destructiva, ya que las partes espaciales de las ondas pueden ser o bien positivas o bien negativas en un rango dado.

La ecuación (5) se generaliza: *1*) usando μ para permitir que ψ_i. represente tanto protones como electrones, y formando un operador de antisimetrización de manera que los términos cruzados siempre resulten negativos multiplicados por el signo del espín o, en este caso, μ, producto. Lo anterior permite la forma apropiada de interferencia en todos los casos, incluidos aquellos en que no todos los números cuánticos espaciales son iguales. Digamos de paso que esta forma de "suma antisimétrica" de la función de ensayo tiene un beneficio adicional. Como el laplaciano es invariante en todo el espacio tridimensional complejo, se puede transformar al centro de masa de cada función monoelectrónica sucesivamente. En estas circunstancias, la ecuación de Schrödinger se aplica de manera individual a cada ψ_i. Esto simplifica enormemente la evaluación del laplaciano que opera sobre la función de ensayo. Esto se demuestra en el apéndice.

La peculiar elección de la ecuación (4) tiene varios efectos benéficos. Uno de los mejores es la relación entre el núcleo y el electrón. Como el término de masa, *m*, es tan grande para el núcleo con respecto al electrón, desaparecen todos los términos cruzados, menos a distancias nucleares. Como el momento magnético del protón y el neutrón es tan inferior al momento magnético del electrón, las interacciones magnéticas son lo bastante pequeñas para poder descartarlas, como es deseable en este estudio particular. El resultado neto es que la ecuación de Schrödinger para un conglomerado de núcleos y electrones puede tratar todos los núcleos como fuentes puntuales, sin los términos cruzados de interferencia espectral. Por último, la ecuación resultante se parece mucho a la ecuación tradicional, salvo que existe en el espacio tridimensional complejo en vez del espacio de Hilbert.[17]

LA INTERPRETACIÓN DE Ψ*Ψ

Bohr y sus amigos quisieran que interpretáramos Ψ*Ψ como la densidad de probabilidad de la posición del electrón. En el espacio de Hilbert, esta interpretación no resulta muy útil. Hay un número infinito de geometrías del espacio de Hilbert que darán la misma proyección en el espacio tridimensional. Tenemos alguna esperanza de asociar mediciones significativas únicamente con esta proyección. En realidad, el concepto de densidad de probabilidad tiene algún sentido físico potencial sólo respecto al sistema atómico monoelectrónico. Como hemos conservado la nueva ecuación de Schrödinger en el espacio tridimensional complejo, podemos analizar el caso del átomo monoelectrónico en este sentido. Cabe recordar que, en la escala cuántica, debido al principio de incertidumbre de Heisenberg, no podemos seguir la evolución de un sistema en detalle. Lo único que tiene importancia física son los valores medios, promediados en el espacio y el tiempo. Sólo algunos de estos valores medios son constantes del movimiento, esto es, sus operadores son conmutables con el hamiltoniano. En el espacio tridimensional complejo, multiplicar el término Ψ*Ψ por la carga electrónica total lo convierte en una densidad de carga al igual que en una densidad de probabilidad. La prueba es como sigue: tomar una celda de la densidad de probabilidad en el instante t. El electrón está o no está allí. Si lo está, entonces la ley de Coulomb se aplica a la dinámica del sistema. Si no, la ley de Coulomb se aplica por defecto como el resultado nulo. Por tanto, cada celda de la densidad de probabilidad se comporta como si fuera una carga infinitesimal de valor igual al producto de la densidad de probabilidad en ese punto por la carga electrónica total del sistema. Esto es posible sólo en el caso de que la ecuación y sus soluciones permanezcan en el espacio tridimensional complejo.

No tenemos garantía de que la ley de Coulomb funciona al nivel atómico o subatómico sin someter a prueba la hipótesis. Por fortuna, esto se consigue sin dificultad usando el teorema de virial. Comenzaremos por aceptar los postulados de Schrödinger, pero tomaremos con reserva el término de la energía potencial. Examinaremos un sistema que incluye un electrón y un protón, ya que éste se generaliza fácilmente a un núcleo y un electrón, y se requiere un sistema con límites matemáticos a fin de valernos del teorema de virial. Supondremos que la forma funcional de la repulsión electrón-electrón debe ser en cierto modo análoga a la interacción atractiva protón-electrón, y que estamos abordando una fuerza de dos cuerpos. Nuestra función de ensayo implicará la suma antisimétrica de una función "pesada" de protón y una función "ligera" de electrón con momentos magnéticos apropiados. Formamos el valor medio del operador de la energía cinética operando sobre la función de ensayo, multiplicando por la izquierda por el conjugado complejo de la función de ensayo e integrando la totalidad en todo el espacio. Por el teorema de virial, dado que esperamos un campo central, podemos esperar que la energía potencial media sea de sólo –2 por la energía cinética media. Cuando se evalúa el laplaciano usando la ecuación de Schrödinger monoelectrónica y se integra en todo el espacio, se descubre que: *1*) desaparecen todos los términos cruzados, menos los de las distancias nucleares; *2*) las interacciones espín-espín son muy pequeñas y se pueden ignorar; *3*) la forma final de la expresión se ajusta a la forma que se requiere al determinar matemáticamente el valor medio de la ley de Coulomb para este caso usando la función de ensayo, *sólo en* $\varepsilon = 0$. En el caso de que $\varepsilon > 0$, una fórmula complicada relaciona la energía potencial con los parámetros del sistema. Si conservamos la forma conocida de la ley de Coulomb, podemos usar el teorema de virial de cada valor de ε para determinar el valor de β, que satisfará la dependencia requerida. Seleccionamos éste como el enfoque más simple por ahora. Parece que nos da un buen grado de equiparabilidad con la experimentación, y afecta mínimamente a la base teórica de nuestro trabajo. Aunque los resultados numéricos son correctos, la exposición es un tanto especulativa. Para describir por completo la interacción de Coulomb, el sistema debe hacerse totalmente covariante en un formalismo relativista. Lo anterior queda fuera del alcance de este capítulo.

Al requerir que la ecuación de Schrödinger y sus soluciones permanezcan en el espacio tridimensional complejo, hemos logrado algo interesante. Las funciones de ensayo son en realidad la suma, si bien antisimétrica, de las funciones monoelectrónicas. Basta manipular un poco la ecuación resultante, y sugerir que las funciones monoelectrónicas se reordenen en representaciones monoelectrónicas individuales, para conseguir un conjunto de ecuaciones simultáneas que tienen la misma forma funcional que las ecuaciones de Kohn y Sham, sólo que: *1*) la interpretación física de los símbolos difiere; *2*) la inferencia funciona para todos los estados: fundamentales y excitados, y *3*) se requiere una forma funcional definida de la energía de intercambio-correlación. Aun así, *la forma funcional es exactamente la misma* una vez que se generaliza el sistema. Aquí se propone que, sometido a la prueba del "pato", el sistema la superaría al instante. Los cálculos de muestras de sistemas simples indican resultados de una precisión que dista pocos puntos porcentuales de la experimentación, considerando algunos supuestos simplificadores. Algunos de estos resultados se presentan en el cuadro XIII.1, pero las inferencias reales quedan fuera del alcance de este capítulo.

¿Qué significa explicar algo? Parece bastante cómodo desconfiar de la simple presentación de un número, esto es, el cálculo de todas las configuraciones posibles y la elección de la de mínima energía. Sin embargo, este modo de explicar parece gozar de alguna popularidad, sobre todo entre los físicos, aunque también entre otros científicos.[18]

Podemos explicar algo usando información externa a la disciplina del discurso; un ejemplo es el empleo de la datación por el radiocarbono para explicar la edad de un objeto. También tendemos a dar explicaciones de asuntos insuficientemente entendidos haciendo referencia a conceptos que a nuestro parecer se entienden mejor. ¿Hasta qué grado tal ejercicio se vuelve circular?

Ya hemos empezado a explicar las cosas de manera no tradicional con la figura XIII.1. Hay mucho más. Tomémoslo paso a paso a partir de las secciones introductorias y agreguemos sobre la marcha algunos puntos de interés. No obstante, algunas de estas explicaciones son en parte conjeturas y su comprobación exige más estudios calculatorios. Estos casos se harán notar expresamente más adelante en el texto.

Desde luego, nunca es posible dejar a un lado el problema de la congruencia interna planteado por Feller y Peterson (Scerri, 1998a, 1998b, 1998c), pero téngase en cuenta que mientras los sistemas convencionales requieren literalmente cientos de configuraciones para tener éxito en cálculos *ab initio* (véase Kinghorn y Adamowicz, 1997), y muchísimas iteraciones en cálculos de densidad funcional, incluso los modelos simples que se listan más adelante concuerdan con la experimentación con márgenes de pocos puntos porcentuales, con una sola configuración y cero iteraciones. Los cálculos enumerados en el apéndice y en el cuadro XIII.2 concuerdan con la experimentación a un grado asombroso, también con una sola configuración y cero iteraciones. Cualquier persona familiarizada con las soluciones de serie sabe que la serie converge hacia la solución de la ecuación en cuestión. Si la respuesta es equivocada, esto es, si no concuerda con la experimentación, entonces la ecuación es equivocada. En nuestro caso, casi todo el resultado experimental se recupera en una sola configuración y cero iteraciones. Una concordancia tan ajustada a la naturaleza parece muy significativa.[19]

Cuadro XIII.2. *Cálculos orientados al descubrimiento*

Elemento	H^-	He-I	Li-II	Be-III	B-IV	C-V	N-VI	O-VII
Energía								
CAI	–0.5724	–3.1037	–7.6349	–14.1662	–22.6974	–33.2287	–45.7599	–60.2912
CAISE	–0.5295	–2.9039	–7.2816	–13.6627	–22.0471	–32.4350	–44.8262	–59.2208
Completa	–0.4482	–2.8232	–7.1982	–13.5732	–21.9482	–32.3232	–44.6982	–59.0732
CompletaSE	–0.5275	–2.9050	–7.2836	–13.6639	–22.0466	–32.4329	–44.8242	–59.2231
Exp.	–0.5277	–2.9049	–7.2836	–13.6637	–22.0463	–32.4329	–44.8248	–59.2228

Nota: Los valores experimentales son de Moore. El error por redondeo para la integración numérica se calcula en aproximadamente ±0.0005. CAI, calculada con corrección de autointerferencia; CAISE, calculada con CAI y una corrección semiempírica de forma $0.98429 - 0.161599\beta + 0.001690\,\beta^2$; Completa, calculada sin corrección; CompletaSE, calculada con corrección semiempírica basada en la fórmula $0.075 + 0.003\exp(0.403\beta)$.

La mecánica cuántica tradicional nunca ha explicado satisfactoriamente el enlace químico. Agitamos las manos y hablamos de valencia en contraposición a electrones apareados, pero nos quedamos mudos al ver que los electrones de valencia de los elementos del grupo II, p. ej., están apareados. Existen muchos otros problemas. Con el nuevo modelo, vemos que todo es una función de la interferencia espectral entre las ondas de electrones. Los enlaces iónicos muestran a todas luces en los cálculos cómo uno o más electrones se transfieren físicamente de un átomo a otro. El cálculo $\Psi^*\Psi$ demuestra esto claramente en el proceso del propio cálculo. Los enlaces de Van der Waals muestran sin lugar a duda la interacción de los momentos de cuadrupolo de los átomos participantes, que son dictados por la interacción entre la repulsión electrón-electrón y la interferencia espectral entre los electrones interactuantes de cada átomo. Los enlaces metálicos muestran claramente las ondas de electrones que permean todo el espacio del metal debido a la interferencia espectral, y que se vuelven una especie de "sopa grumosa" de ondas indistinguibles, interfirientes constructiva y destructivamente. Aun así, el enlace covalente es más fascinante. En el nuevo modelo, el enlace covalente en realidad está partido en dos formas separadas. La forma "común" es aquella en la que los electrones son compartidos en efecto por los átomos, además de enlazarse a través de la interferencia constructiva. Ejemplos de ello son la molécula de hidrógeno y el bióxido de carbono. En estos casos, los electrones de los átomos interactuantes tienen los mismos números cuánticos principal y angular, y son totalmente intercambiables. La posición media de los electrones tiende a fluctuar entre los átomos participantes, antes que estar integrada en uno u otro, aunque está muy localizada. La forma "interferencial" es en realidad consecuencia de la interferencia constructiva entre electrones que se encuentran en estados cuánticos diferentes, obtenidos de los dos o más átomos. Entre los ejemplos se cuentan el agua y otros compuestos en los que los electrones de un átomo se encuentran en un estado cuántico distinto que los electrones del otro. El enlace químico es resultado de la interferencia constructiva entre las ondas de electrones, y la presencia

de los núcleos atractivos neutraliza la repulsión de Coulomb. Los electrones tienden a estar asociados más estrechamente con sus "propios" átomos, sin hacer otra cosa que "estrecharse la mano", por así decirlo, para formar el enlace.

Sostener que la mecánica cuántica tradicional explica la tabla periódica es un craso error (Scerri, 1998a, 1998b, 1998c).[20] No obstante, el nuevo modelo tiene mucho que decir. Un problema es la cuestión de los elementos del grupo II. Con razón cabría esperar que fueran químicamente inertes. Los electrones de valencia están apareados. Un resultado más bien sutil del nuevo modelo es la cuestión del bosón de espín cero. Si los electrones apareados llegan a estar lo bastante cerca uno del otro, como ocurre en los átomos más pesados o aun en un sistema tan simple como el helio, la interferencia constructiva es tan completa que los electrones pierden toda identidad y en efecto forman un bosón de espín cero (véase la figura XIII.1b). Se trata del mismo bosón de espín cero famoso por la teoría de la superconductividad de BCS [Bardeen, Cooper y Schrieffer], pero también existe en los sistemas atómicos. Una conjetura interesante se cumple en el caso de los elementos del grupo II: la carga nuclear es lo bastante pequeña y los electrones cercanos al núcleo están contenidos de manera suficientemente compacta para empujar a los electrones exteriores de valencia a posiciones demasiado alejadas y partir el bosón de espín cero en dos electrones vulnerables, que siguen laxamente apareados. El resultado neto: los átomos del grupo II que interactúan químicamente con otros tienden a perder ambos electrones a la vez. De manera similar, los electrones del grupo II unidos por enlaces metálicos tienden a ceder ambos electrones simultáneamente a la sopa de electrones del enlace metálico. La naturaleza estructurada de los pseudopares de esta sopa tiende a hacer metales más bien deficientes de tales combinaciones. Verifican en parte esta noción algunos de los cálculos preliminares que aparecen en el cuadro XIII.1.

Quizá un ejemplo más dramático, aunque un tanto conjetural, sea la explicación de la regla de Hundt. Usaremos como ejemplo el sistema de electrones 2p, pero la demostración se aplica a todos los estados electrónicos. Véase en la figura XIII.2 una ilustración estilizada de este argumento. (Las imágenes son representaciones gráficas del contorno real de las secciones transversales *x*-*y* de las distribuciones de cargas de los electrones interfirientes, pero los valores *β, ε* y los parámetros de superposición son estimados. Los electrones interfirientes son en realidad lo que normalmente se denomina funciones 2p-*x* y 2p-*y*, que son una combinación lineal de los estados 2p.) Supongamos que vamos caminando por la tabla periódica, de número atómico en número atómico. La configuración actual es $1s^2 2s^2$, y avanzamos al número atómico 5. La energía dicta que el siguiente espacio abierto se encuentra en la subcapa 2p, pero no hay preferencia por el siguiente electrón. En el nuevo modelo, este electrón se listará como superposición de todos los estados posibles 2p, que denominaremos $2p_{-1}\uparrow, 2p_0\uparrow, 2p_{+1}\uparrow, 2p_{-1}\downarrow, 2p_0\downarrow, 2p_{+1}\downarrow$; donde representamos el estado del espín con una flecha hacia arriba o hacia abajo. No tenemos manera de saber en cuál de estos estados, o en qué combinación de ellos, se encuentra el sistema, a menos que realicemos una especie de experimento, como hacerlo reaccionar con otro átomo, pero no importa. Vayamos un poco más allá. Avanzando al número atómico 6, podemos agregar otro electrón, también en la subcapa 2p, pero ahora

el modelo impone algunas exigencias. Los subestados $2p_{-1}$ y $2p_{+1}$ interfieren constructivamente si tienen los mismos espines, ya que uno tiene una parte espacial positiva mientras que el otro tiene una parte espacial negativa. Esto produce una preferencia energética pequeña, pero inequívoca, por la configuración $1s^2 2s^2 2p_{-1} 2p_{+1}$ con los espines exteriores alineados. Ahora, dando un paso adelante, al número atómico 7, tenemos una situación en la que existe una dirección preferente en el espacio debido a la alineación magnética de los dos anteriores espines. Para reducir la energía magnética, se obligará al siguiente electrón a adoptar el estado $2p_0$ con el mismo espín que los otros dos. No es hasta el siguiente paso, en el número atómico 8, donde hay suficiente energía para producir apareamiento, y el par preferente es $2p_0\uparrow$ $2p_0\downarrow$. El siguiente paso, al número atómico 9, obligará a que se rompa la interferencia constructiva original entre los subestados $2p_{-1}$ y $2p_{+1}$ para permitir que uno o el otro quede apareado. Finalmente, el último estado libre quedará apareado en el neón. Ésta es exactamente la regla de Hundt. Se justificaría preguntar por qué el par original no pudo romperse hasta el número atómico 9. Esto es sutil, pero importante. Si hubiéramos de considerar los viejos modelos de tamizado, nos perderíamos. El radio medio de cualquier función monoelectrónica viene dado por:

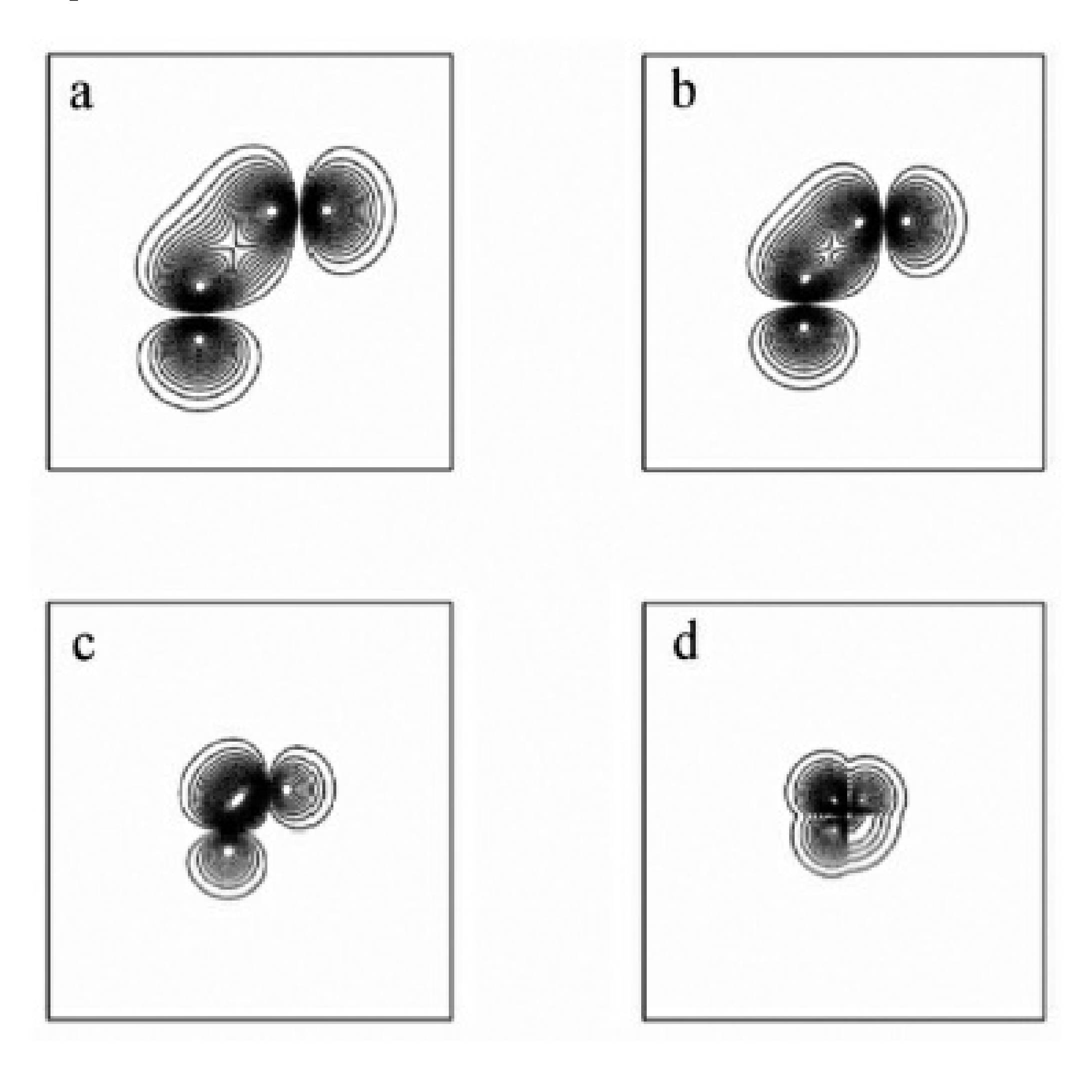


FIGURA XIII.2. *Comparación del desplazamiento de las funciones monoelectrónicas 2p-x + 2p-y, mismo espín, del carbono al flúor*: a) *carbono;* b) *nitrógeno;* c) *oxígeno;* d) *flúor*.

$$\langle r \rangle = \frac{1}{2\beta}\left[3n^2 - \ell(\ell+1)\right] \qquad (6)$$

donde, en este caso, β es la carga nuclear efectiva. Una mirada a la tabla periódica, sin embargo, indica que todos los átomos tienen aproximadamente el mismo radio medio. Por tanto, cada onda electrónica debe ver casi toda la carga nuclear, sólo que ligeramente modificada por la presencia de los otros electrones. En este nuevo modelo, no hay dos ondas electrónicas que puedan ser concéntricas, sino que la separación media entre sus centros de masa está determinada por la carga nuclear. Además, hay que mirar las formas geométricas asociadas con las funciones 2p. La figura XIII.2 muestra la imagen de la sección transversal *x*-*y* de las funciones monoelectrónicas 2p-*x* + 2p-*y*, ambas con el mismo espín, de: *a*) el átomo de carbono, *b*) el átomo de nitrógeno, *c*) el átomo de oxígeno y *d*) el átomo de flúor.

En el oxígeno, la atracción nuclear es lo bastante débil para permitir que las dos ondas interfieran fuertemente en el extremo superpuesto. En el flúor, las dos ondas son atraídas de manera casi concéntrica y la superposición es mucho menor, lo que permite que tome precedencia la superposición del apareamiento. Ésta es la causa del ángulo particular de enlace del agua, y un efecto similar es responsable de la peculiar configuración del cromo. Aunque el modelo predice una simetría esférica hasta que se realice algún experimento, se elige entonces una combinación particular de las funciones de la subcapa para ajustarse a los requerimientos ambientales.[21] Cabe hacer notar que el parámetro de separación no es una variable dinámica, sino que sirve tan sólo como parámetro de optimización para encontrar la energía mínima del sistema.[22] La adición de otro electrón o de un campo perturbador, o el enlace con otro átomo, puede eliminar cualquier simetría potencial de la distribución de cargas.

La predicción de las estructuras cristalinas también puede hacerse con el nuevo método. Los requerimientos de interferencia dictan formas definidas de interacción de unos átomos con otros, como lo muestra el modelo del oxígeno y la formación del agua citado en el párrafo anterior. Es posible hacer modelos de arcilla de tales estructuras y juntarlos para formar modelos de moléculas, cristales y aun vidrios. Incluso el típico universitario de pregrado, sin especialización, puede entender fácilmente una breve sesión con estos modelos de arcilla de las estructuras de diversos materiales. Deben hacerse los cálculos completos para dar ángulos de enlace definitivos, parámetros medios de malla y distribuciones de cargas finales, pero los modelos funcionan bastante bien para predicciones cualitativas. Algunos de los cálculos preliminares del cuadro XIII.1 verificaron estas predicciones, y se hicieron modelos de varios átomos y moléculas de las filas 1 y 2 de la tabla periódica.[23]

Una de las predicciones más interesantes del nuevo método es la cuestión del principio de exclusión de Pauli. Cuando se intenta calcular la energía de un antipar, de inmediato se descubre que el sistema carece de límites matemáticos: la proporción teorema de virial

no funciona. Hacen falta más trabajos, pero una vez que se introducen en la estructura electrones del continuo, debería ser posible calcular directamente el déficit de energía que se encuentra al infringir el principio de exclusión de Pauli. Esto da una explicación significativa del principio en relación con la interferencia constructiva y destructiva.

Cuando apenas se empezaba a construir este modelo, resultaba tan poco convencional que fue necesario desarrollar alguna prueba para determinar su utilidad. Íbamos a hacer cálculos muy distintos de los prefabricados que se consiguen hoy y, peor aún, usaríamos un sistema de funciones no ortonormales. Para este estudio se empleó una aproximación simple, llamada método de restricciones no holonómicas, en el cual la interacción electrón-electrón se remplazó obligando a las ondas electrónicas a permanecer lo más lejos posible entre sí, y permitiéndoles vibrar según los modos vibracionales de las moléculas. Otras técnicas aplicaban núcleos estáticos o la nueva versión de la teoría del funcional de la densidad. Los resultados de varios sistemas simples se dan en el cuadro XIII.1

El éxito de estos resultados preliminares se consideró suficiente para continuar el proyecto. De hecho, algunas de estas aproximaciones simples pueden ser adecuadas para ciertas aplicaciones comerciales. Estos resultados con frecuencia muestran demasiado enlazamiento, sobre todo con el método de restricciones no holonómicas. Normalmente, como el trabajo tradicional se basa en un principio variacional, el enlazamiento es insuficiente, pero estos modelos están demasiado restringidos y pueden perder parte de la energía cinética o parte del potencial de interacción electrón-electrón.

El modelo completo está todavía en proceso de desarrollo y sigue dando nueva información. En el apéndice se revisa un ejemplo en el que las energías calculadas concuerdan con los experimentos en cuanto a la serie isoelectrónica desde el ión negativo del hidrógeno hasta el oxígeno-VI. De este cálculo se derivan varias implicaciones interesantes: *1*) intentos anteriores corregían la autointerferencia eliminando lo que parecían ser términos obvios, pero este nuevo cálculo indica que las ondas electrónicas están mezcladas tan íntimamente que quizá se requiera alguna autointerferencia para modelizar la realidad con exactitud. Sólo son aptos aquellos términos que dan por resultado una constante (en relación con ε). *2*) Los dos cálculos que usan la expansión armónica esférica de la interacción electrón-electrón, considerando cada elemento del espacio multiplicado por $\Psi^*\Psi$ y el número de electrones como carga infinitesimal, dan resultados relativamente deficientes en relación con los elementos más ligeros hasta que se aplican unas correcciones muy simples. Las correcciones se aplican a la energía media total, pero no al virial, lo cual indica que hay un componente hasta ahora inadvertido de la interacción, que es perpendicular al vector del radio. *3*) La corrección descrita se aplica sólo al mínimo de la curva de energía media ε, por lo que debe hallarse una forma funcional de toda la corrección. La conjetura del autor es que el espín debe tratarse como la carga, esto es, distribuido en toda la onda electrónica. Tradicionalmente, los espines apareados agregarían cero componente magnético a la energía, pero una densidad de espines permite que los espines apareados proporcionen alguna energía atractiva, como ocurre con dos imanes colocados lado a lado con los polos opuestos adyacentes. La mayor parte de la energía adicional, sin embargo, sería repulsiva de los vecinos más próximos que están arriba y abajo, lo que da peso al uso de la mencionada corrección

parcial de autointerferencia. El tamaño de la corrección debe ser aproximadamente correcto dado que las interacciones magnéticas oscilan en un orden de magnitud más pequeño que las interacciones electrostáticas. Significativamente, hay un componente de la interacción dipolo-dipolo que es perpendicular al vector del radio, y afecta así al potencial, mas no al virial como requieren las observaciones en curso.

EL FUTURO

Hemos intentado ilustrar los problemas asociados con un cambio importante de la visión e interpretación de una teoría científica aceptada. El nuevo enfoque se ha ilustrado a grandes rasgos; el autor se disculpa por los detalles técnicos necesarios para describirlo, pero, sobre todo en este caso, el diablo está en los detalles.

El trabajo en este nuevo enfoque continúa. Quedan muchos problemas sin resolver, debido en parte a que el autor está enteramente imbuido de los métodos tradicionales de la mecánica cuántica, y hacen necesario encontrar y bloquear los callejones sin salida de la investigación. La interacción del modelo actual se presenta, corregida, en el apéndice.

De máxim*a priori*dad es la confirmación o refutación de la conjetura sobre la densidad de espines. Se espera que en un futuro no muy lejano se calculen varios sistemas significativos de átomos polielectrónicos en estados fundamentales y excitados, por medio de moléculas poliatómicas, y se usen como prueba de la eficacia de este método. Con el tiempo se desarrollará un modelo covariante totalmente relativista. Además del interés filosófico y científico fundamental, hay un posible interés comercial (Eberhart, 1994).[24] El proceso de cálculo se acelera mucho cuando sólo hay que hacer una configuración y cero iteraciones, pero muchos de los cálculos son más sencillos desde el punto de vista funcional. Poder predecir la estructura molecular o material de un sistema ha sido hasta hoy casi una fantasía. Estas propiedades mejoradas revisten gran interés para los diseñadores y fabricantes tanto de nuevos fármacos como de nuevos materiales. Desafortunadamente, a menos que el nuevo enfoque alcance aceptación académica, no es probable que tales aplicaciones se materialicen. En todo caso, se han planteado muchas preguntas relacionadas con la filosofía de la química. Hará falta una buena dosis de intuición para responderlas adecuadamente.

Ondas electrónicas en la configuración $1S^2\,{}^1S_0$: investigación orientada al descubrimiento

El desarrollo de este sistema simple, pero importante, ilustra las matemáticas del nuevo método, pero también muestra algunas de las dificultades que surgen en el desarrollo de una idea nueva. El enfoque tradicional sería formar el operador hamiltoniano y luego aplicarlo a la función de ensayo para formar la ecuación de Schrödinger. Para compensar el carácter alargado de la onda electrónica debemos tratar los valores medios de los operadores al principio. La figura XIII.3 muestra la representación gráfica usada para este desarrollo.

En la figura XIII.3 las dos ondas electrónicas se ilustran como funciones simuladas 1s, una con su centro de masa en la parte positiva del eje z, a una distancia ε_1 del núcleo, en el origen, la otra en la parte negativa del eje z, a una distancia ε_2 del origen. Un volumen infinitesimal arbitrario está representado por el cubito colocado al final de los vectores de radios: r_1 desde el centro de la primera onda; r desde el núcleo, y r_2 desde el centro de la segunda onda. La figura es la sección transversal del plano x-z.

Usando el hecho de la invariancia del laplaciano en el espacio tridimensional, la energía cinética media, T', está dada por

$$T' = -\int_{todo}^{espacio} \Psi^* \nabla^2 \Psi \mathrm{d}\tau = -\frac{1}{\gamma}\int \psi_1^* \nabla^2 \psi_1 + \psi_2^* \nabla^2 \psi_2 - \mathrm{o}\left(\psi_1^* \nabla^2 \psi_2 + \psi_2^* \nabla^2 \psi_1\right) \mathrm{d}\tau \tag{7}$$

donde hemos usado la función de ensayo, Ψ, y sumado los dos electrones. La ecuación se expande como se muestra en la ecuación (5). Como Ψ se normaliza a 1, el factor de normalización, γ, tiene la forma

$$\gamma = 2\,(1 - \mathrm{o}\ \mathrm{Re}\,(S_{1,2})) \tag{8}$$

donde o es el signo del producto de los espines, y tomamos la parte real de la integral de superposición, $S_{1,2}$. La integral de superposición y la integral U están definidas por

$$S_{i,j} = \int_{todo}^{espacio} \psi_i^* \psi_j \mathrm{d}\tau \qquad U_{i,j,k} = \int_{todo}^{espacio} \frac{\psi_i^* \psi_j}{r_k} \mathrm{d}\tau \tag{9}$$

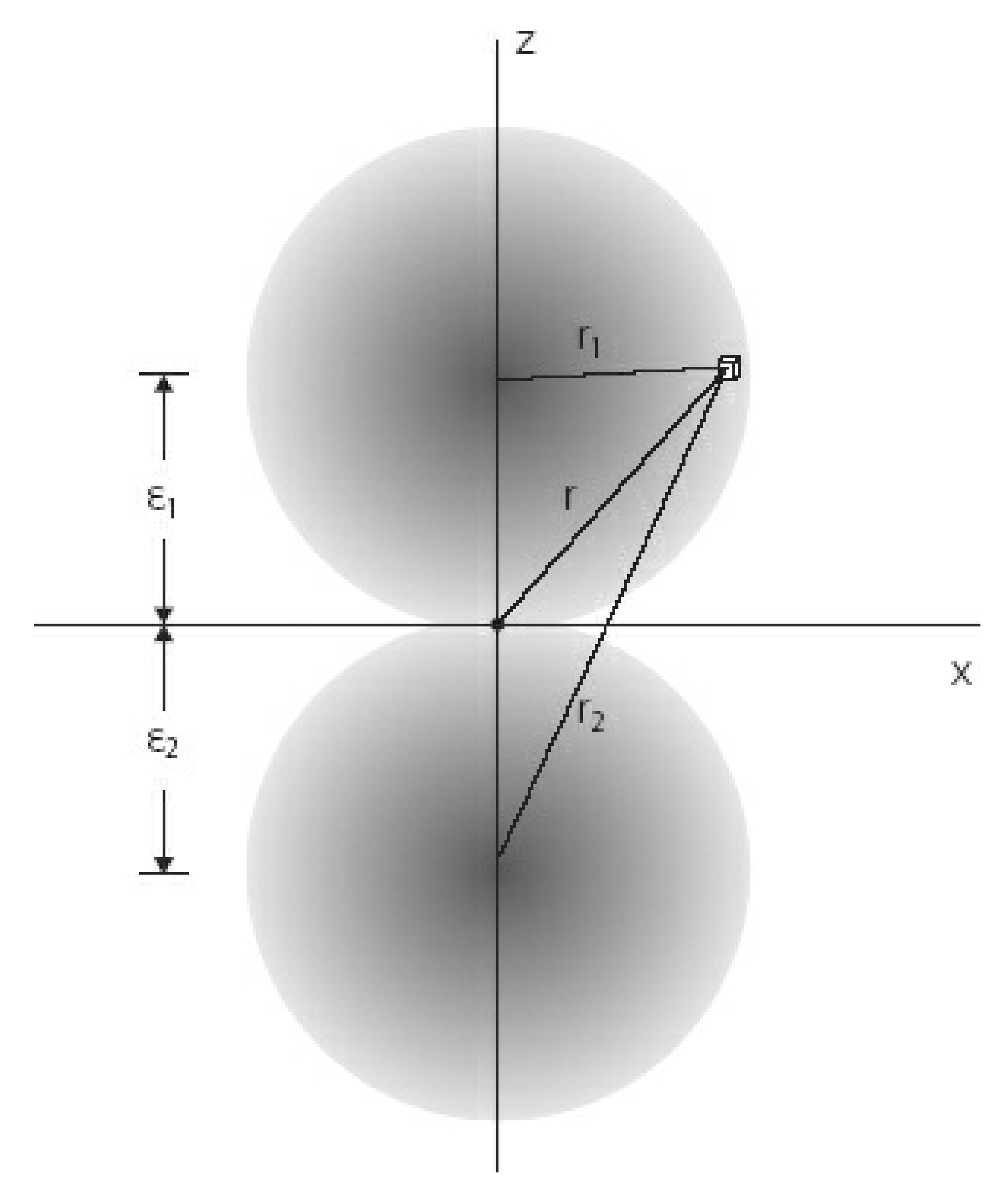


FIGURA XIII.3. *Sistema atómico bielectrónico en la configuración $1s^2$.*

Las funciones ψ_i son ortonormales sólo cuando la separación entre sus centros de masa es igual a cero. Por la invariancia del laplaciano, podemos usar las relaciones derivadas de la solución del caso del sistema atómico monoelectrónico

$$\nabla^2\psi_i = \left(\frac{\beta_i^2}{n_i^2} - \frac{2\beta_i}{r_i}\right)\psi_i \quad \int_{todo}^{espacio} \psi_i^* \nabla^2 \psi_i \mathrm{d}\tau = -\frac{\beta_i^2}{n_i^2} \quad \int_{todo}^{espacio} \frac{\psi_i^* \psi_i}{r_i} \mathrm{d}\tau = \frac{\beta_i}{n_i^2} \qquad (10)$$

de modo que la ecuación (7) se convierte en

$$T' = \frac{\left(\beta_1^2\left(1+\mathrm{o}S_{2,1}\right)/n_1^2\right)+\left(\beta_2^2(1+\mathrm{o}S_{1,2})/n_2^2\right)-2\mathrm{o}\left(\beta_1 U_{2,1,1}+\beta_2 U_{1,2,2}\right)}{2\left(1-\mathrm{o}\,\mathrm{Re}\left(S_{1,2}\right)\right)} \quad (11)$$

La energía potencial media de interacción entre la onda electrónica resultante y el núcleo es

$$V' = -Z_{\mathrm{a}} \int_{todo}^{espacio} \frac{\Psi^* \Psi}{r} \mathrm{d}\tau = -Z_{\mathrm{a}} \frac{U_{1,1,0}+U_{2,2,0}-\mathrm{o}\left(U_{1,2,0}+U_{2.1.0}\right)}{1-\mathrm{o}\,\mathrm{Re}\left(S_{1,2}\right)} \quad (12)$$

donde hemos aprovechado la homogeneidad de la onda resultante; no hay necesidad de abordar cada onda monoelectrónica de manera independiente. Esto, por cierto, es verdadera indistinguibilidad de los electrones, consecuencia natural de este modelo, y sólo en la mecánica cuántica tradicional debe introducirse forzadamente en el sistema.

El siguiente paso es uno de los viejos espantajos de Schrödinger, la determinación de la interacción electrónica, v', sin acudir al espacio de Hilbert. La forma funcional es engañosamente simple:

$$v' = \int_{todo}^{espacio} \frac{\Psi^* \Psi}{r_{\mathrm{a,b}}} \mathrm{d}\tau \quad (13)$$

donde, para la teoría tradicional, $r_{\mathrm{a,b}}$ es la distancia entre los electrones, y debe expandirse en una suma de armónicos esféricos como se hace en la teoría electromagnética clásica. Podemos abordarla de la misma manera con el nuevo método, aunque los resultados al principio parecen poco deseables. La energía calculada para el ión negativo del hidrógeno recupera sólo 85% del valor experimental, y la del He-I sólo 97%. Las cosas mejoran a un ritmo constante, y al llegar al Li-II la energía calculada recupera 99% del valor experimental. El autor ha tropezado con varias maneras de hacer esto procurando no perder el contacto con los métodos tradicionales. Por ejemplo, cabría esperar que se hiciera alguna corrección de la autointerferencia.

Los antiguos griegos desarrollaron sus ideas geométricas a partir de modelos de madera o barro y dibujos en la arena. No era hasta entonces cuando volvían a las matemáticas para demostrar sus nuevos teoremas. Este mismo proceso de descubrimiento ha guiado el presente trabajo, sólo que los modelos han adoptado la forma de nuevas ecuaciones cotejadas con la experimentación, y el uso de ajustes semiempíricos para afinarlas. Si tal ajuste resultaba sólido bajo el cambio de un sistema, configuración, etc., a otro, entonces había que hallar alguna razón teórica que lo justificara e incorporarla al cuerpo fundamental de la teoría. Si no resultaba sólido, se descartaba y se ensayaba otro camino. El último ejemplo ilustra esta práctica.

El método más reciente se basa en la noción de que el producto de $\Psi^*\Psi$ por el número de electrones es igual a la densidad de carga del sistema. Esto funciona muy bien en la interacción electrón-núcleo, y a todas luces da el valor de V' que se encuentra en la ecuación (12).[25] De este modo observamos la interacción de un elemento de carga de

la onda resultante con otro, e integramos en todo el espacio para hallar la interacción total. Esto toma la forma de la ecuación (14)

$$\nu' = \frac{1}{2} \int_{todo}^{espacio} \Psi_a^* \Psi_a \int_{todo}^{espacio} \frac{\Psi_b^* \Psi_b}{r_{ab}} d\tau_b d\tau_a \qquad (14)$$

La expansión de lo anterior resulta bastante confusa y no vamos a reproducirla aquí. Se incluye el factor ½ para impedir un conteo doble. La ecuación (14) se expandió primero en general, conservando todos los términos, y luego se hizo un cálculo por separado, que incluía una corrección de autointerferencia equivalente a eliminar aquellos términos en los que un componente interactuaba consigo mismo de tal manera que el resultado era independiente de ε.

Ahora debemos determinar el virial, que no es sino el producto puntual del vector de radio por la fuerza ejercida sobre el electrón en cada elemento de la "otra" onda electrónica. Algún análisis de vectores da

$$\overline{\omega}' = \frac{\nu'}{2} \qquad \varsigma' = V' + \overline{\omega}' \qquad (15)$$

donde $\overline{\omega}'$ es la porción electrón-electrón del virial; ς' es el virial total, y la proporción del virial, P, está dada por

$$P = \frac{\varsigma'}{T'} = -2 \qquad (16)$$

En la práctica, se eligen o, Z_a y ε, y la ecuación (16) se resuelve por β. Este valor se usa en la ecuación de energía para hallar la energía propia como función de ε. El mínimo de esta curva da la energía propia del sistema para su uso en todos los cálculos de parámetros atómicos y moleculares. Para las configuraciones $1s^2$ se aplican muchas simetrías, lo que reduce enormemente la dificultad calculatoria. Como se ha dicho, los resultados en bruto son relativamente deficientes, pero el análisis del error absoluto muestra que bastan correcciones muy simples para alinear los datos calculados con los datos experimentales. Extrañamente, tal corrección ha de aplicarse a ν', pero no a $\overline{\omega}'$.

El cuadro XIII.2 compara los valores calculados con los valores experimentales en unidades de Hartree. Hay entradas de cálculos que contienen una corrección de autointerferencia, la expansión completa de ν' y las correcciones numéricas semiempíricas.

Este ejemplo resalta uno de los principales problemas del desarrollo de una teoría nueva, esto es, ¡que cada revelación abre la caja de Pandora! En este caso, ¿de dónde salen las correcciones? Falta mucho por explicar. Tal es la belleza y al mismo tiempo la frustración de la investigación orientada al descubrimiento. Tanto los estudios preliminares como la teoría completa dan resultados que no deberían ignorarse, resultados que parecen ser consecuentes con la exploración de sistemas cada vez más complicados.[26] Por desgracia, los conceptos se apartan de la tradición lo suficiente

para que el perpetrador dude constantemente de entender totalmente el método o sus implicaciones. A modo de conjetura, el autor sospecha que el espín se debería incluir en la teoría de la misma manera que la carga, para obtener una densidad de espines así como una densidad de carga a partir de $\Psi^*\Psi$. La magnitud es aproximadamente correcta, y tal modificación incluiría una porción que afecta a la interacción electrón-electrón, pero no al virial.

Agradecimientos

El autor desea dar las gracias a la Kansas Technology Enterprise Corporation (KTEC) por la subvención número 150134, y al señor Clyde Engert, ex vicepresidente de Innovación y Mercadotecnia, por su interés y sus esfuerzos personales para encontrar proponentes de este trabajo.

BIBLIOGRAFÍA

Bernholc, J., “Computational Materials Science: The Era of Applied Quantum Mechanics”, *Physics Today*, vol. 52, núm. 9, septiembre, 1999, pp. 30-35.

Bethe, H. A., y E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*, Springer, Berlín, 1957.

Cartwright, N., “The Limits of Exact Science, from Economics to Physics”, *Perspectives on Science*, vol. 7, núm. 3, 1999, pp. 318-336.

Condon, E. U., y G. H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, Nueva York, 1967.

Dreizler, R. M., y E. K. U. Gross, *Density Functional Theory*, Springer, Berlín, 1990.

Eberhart, M., “Computational Metallurgy”, *Science*, vol. 265, núm. 5170, 1994, pp. 332-333.

Feller, D., y K. A. Peterson, “An Examination of Intrinsic Errors in Electronic Structure Methods Using the Environmental Molecular Sciences Laboratory Computational Results Database and the Gaussian-2 Set”, *Journal of Chemical Physics*, vol. 108, núm. 1, 1998, pp. 154-176.

Herzberg, G., *Molecular Spectra and Molecular Structure I. Spectra of Diatomic Molecules*, Krieger, Malabar, Florida, 1989.

Karlgaard, R., “Incomparable Carver”, *Forbes*, vol. 169, núm. 6, marzo, 2002, p. 39.

Kinghorn, D. B., y L. Adamowicz, “Electron Affinity of Hydrogen, Deuterium, and Tritium: A Nonadiabatic Variational Calculation Using Explicitly Correlated Gaussian Basis Functions”, *Journal of Chemical Physics*, vol. 106, núm. 11, 1997, pp. 4589-4595.

Lide, D. R. (ed.), *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 79ª ed., CRC Press, Boca Ratón, Florida, 1999.

Melrose, M. P., y E. R. Scerri, “Why the 4s Orbital is Occupied Before the 3d”, *Journal of Chemical Education*, vol. 73, núm. 6, 1996, pp. 498-503.

Moore, C. E., *Atomic Energy Levels*, vol. 1, National Technical Information Service, Washington, D. C., 1971.

Nagy, A., y H. Adachi, “Total Energy versus One-electron Energy Differences in the Excited-state Density Functional Theory”, *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics*, vol. 33, núm. 16, 2000, pp. L585-L589.

Pesic, P., “Quantum Identity”, *American Scientist*, vol. 90, núm. 3, 2002, pp. 262-267.

Scerri, E. R., “The Electronic Configuration Model, Quantum Mechanics and Reduction”, *The British Journal for the Philosophy of Science*, vol. 42, núm. 3, 1991, pp. 309-325.

———, “Has Chemistry Been at Least Approximately Reduced to Quantum Mechanics?”, en D. Hull, M. Forbes y R. Burian (eds.), *Proceedings of the Philosophy of Science Association*, vol. 1, Asociación para la Filosofía de la Ciencia, East Lansing, Michigan, 1994, pp. 160-170.

———, “The Periodic Table and the Electron”, *American Scientist*, vol. 85, núm. 6, 1997, pp. 546-553.

———, “The Evolution of the Periodic System”, *Scientific American*, vol. 279, núm. 3, septiembre, 1998(a), pp. 78-83.

———, “How Good is the Quantum Mechanical Explanation of the Periodic System?”, *Journal of Chemical Education*, vol. 75, núm. 11, 1998(b), pp. 1384-1385.

———, “Popper’s Naturalized Approach to the Reduction of Chemistry”, *International Studies in the Philosophy of Science*, vol. 12, núm. 1, 1998(c), pp. 33-44.

———, “Editorial 4 (Experimental Display of ‘d’ Orbitals)”, *Foundations of Chemistry*, vol. 2, núm. 1, 2000, pp. 1-4.

———, y L. McIntyre, “The Case for the Philosophy of Chemistry”, *Synthese*, vol. 111, núm. 3, 1997, pp. 213-232.

Schweber, S. S., “Enrico Fermi and Quantum Electrodynamics, 1929-32”, *Physics Today*, vol. 55, núm. 6, junio, 2002, pp. 31-36.

Scott, W. T., *Erwin Schrödinger. An Introduction to His Writings*, University of Massachusetts Press, Amherst, Massachusetts, 1967.

Shermer, M., “I Was Wrong”, *Scientific American*, vol. 285., núm. 4, octubre, 2001, p. 30.

Tegmark, M., y J. A. Wheeler, “100 Years of Quantum Mysteries”, *Scientific American*, vol. 284, núm. 2, febrero, 2001, pp. 68-75.

Wannier, G. H., *Statistical Physics*, Wiley, Nueva York, 1966.

Woit, P., “Is String Theory Even Wrong?”, *American Scientist*, vol. 90, núm. 2, 2002, pp. 110-112.

Wylie, A., “Rethinking Unity as a ‘Working Hypothesis’ for Philosophy of Science: How Archaeologists Exploit the Disunities of Science”, *Perspectives on Science*, vol. 7, núm. 3, 1999, pp. 293-317.

---

[*] Departamento de Servicios a la Comunidad, Colby Community College, 1255 South Range, Colby, Kansas 67701, EUA.

[1] Una de sus varias formulaciones es: “Si parece un pato, camina como pato y grazna como pato, es un pato”. A través de la historia de la ciencia hay ejemplos de que, si bien la forma permanece igual, la interpretación cambia según la época. Un ejemplo es la contracción de Lorentz. La forma se conocía mucho antes de que Einstein desarrollara la relatividad especial.

[2] Véase la interacción entre la publicación de cierto trabajo experimental sobre los “orbitales d” y la reacción a ella como lo ejemplifica el “Editorial 4” de Scerri. A juzgar por los métodos tradicionales, Scerri tiene razón. Se realizan otros “extraños” experimentos relativos a la fisión de un solo electrón, etc. El nuevo método, presentado aquí, ¡permite que se produzca tal prueba experimental! (Scerri, 2000, y escritos a los que remite).

[3] Se puede encontrar un excelente resumen de los métodos modernos en Bernholc, 1999.

[4] El desarrollo de la teoría del funcional de la densidad se presenta en Dreizler y Gross, 1990.

[5] Por ejemplo, el valor calculado del ión negativo del hidrógeno es de –0.527463, en comparación con un valor experimental de –0.527731, pero el valor absoluto del error redondeado es de ~0.0005 con base en el cálculo de algunas de las integrales en orden inverso.

[6] Por congruencia interna entiendo que una corrección aplicada a un caso, digamos, el ión negativo del hidrógeno, es válida para todos los casos del mismo grupo, en este caso desde He-I hasta O-VI, pero la teoría también está desarrollada en general, sin casos especiales en los que ninguna constante deba ajustarse de manera individual o se necesiten adiciones *ad hoc*.

[7] Esta experiencia no es infrecuente, como lo evidencia una carta de Brian K. Ridley al director de *Physics Today*, en el número de septiembre de 1999.

[8] Las energías experimentales se adaptaron de Moore (1971), con excepción de la del ión negativo del hidrógeno, que se adaptó de Kinghorn y Adamowicz (1997). Otros datos proceden de Lide (1999) y Herzberg (1989).

[9] Una parte de este examen destaca la necesidad de una filosofía de la química independiente. Véase Scerri y McIntyre, 1997.

[10] Feller y Peterson (1998) declaran: “Los aumentos directos del tamaño del conjunto base de las funciones

gaussianas de una partícula o el uso de niveles más sofisticados de teoría con frecuencia pueden llevar a un deterioro aparentemente paradójico de la concordancia con la experimentación". Tal cosa difícilmente es característica de una teoría "madura".

[11] La crítica de Max Born de algunos de los trabajos originales de Schrödinger se examina en Scott, 1967.

[12] Véase un comentario de Carver Mead en un artículo sobre él y su libro *Collective Electrodynamics* (Karlgaard, 2002).

[13] Buena parte del contexto histórico se trata en detalle en Scott, 1967.

[14] Véase en Wannier (1966) una excelente discusión del teorema.

[15] Hyllaras no pudo ampliar significativamente su método a los sistemas polielectrónicos.

[16] "Fermi, al investigar este mismo problema de la autoenergía de los electrones, reconoció que las divergencias se debían al carácter puntual de las cargas" (Schweber, 2002).

[17] Este nuevo estudio metodológico se reduce a la ecuación de Schrödinger monoelectrónica para un núcleo y un electrón.

[18] Puede justificarse, en ciertas circunstancias, listar un procedimiento formal para determinar algún valor o resultado como explicación, sobre todo tratándose de algo mecánico.

[19] Hay que mencionar otra cuestión. Todos los cálculos tradicionales se basan en un principio variacional, y por lo mismo pueden dar sólo un límite superior de la energía del sistema en cuestión. Varias formas del nuevo método, en particular el método semitradicional con corrección de autointerferencia mencionado en el apéndice, siempre da energías demasiado bajas, esto es, limitantes sobremanera. En consecuencia, el nuevo método produce un límite más bajo del sistema de que se trata. Ésta es una capacidad nueva y de considerable interés, como señala Scerri en varios de sus trabajos.

[20] Sin embargo, se han hecho algunos fascinantes intentos. Véase Melrose y Scerri, 1996.

[21] Desde el punto de vista matemático, los coeficientes de los términos de la resultante están determinados por los valores de contorno.

[22] Los intentos de basar toda la teoría en un término de energía cinética asociado con el parámetro de separación suelen fracasar. Sólo en el método de restricciones no holonómicas se han obtenido resultados con la interpretación dinámica del parámetro de separación, y ésta cae por tierra con el sistema atómico monoelectrónico.

[23] A diferencia de los sistemas tradicionales de modelización molecular, estos modelos de arcilla encajan unos en otros como piezas de rompecabezas. Por ejemplo, el modelo primitivo del ión negativo del hidrógeno es parecido a un hueso para perro. Las piezas encajan dejando cámaras adecuadas para insertar el ión positivo del litio, por lo que se calcula que el hidruro de litio tiene la estructura del cloruro de sodio. Una relajación final, sin embargo, combina las ondas electrónicas de tal manera que cada núcleo aparece rodeado de una nube de electrones esféricamente simétrica, de forma muy parecida a la del modelo convencional. En este último son los tamaños relativos de los iones lo que produce la estructura. Otro ingenioso modelo es el de la transformación del hielo en agua. Cuando los enlaces del hidrógeno están activos, la ordenación de las moléculas adopta una configuración tridimensional muy específica, llena de hoyos. En estado líquido, las moléculas encajan libremente entre sí formando una estructura mucho más compacta. Es una excelente manera de mostrar al estudiante universitario por qué el hielo es menos denso que el agua.

[24] Pharmacopia, una empresa de muchos millones de dólares, lleva ya varios años comercializando programas informáticos para este fin usando métodos tradicionales.

[25] Debe señalarse que cuando esta construcción se aplica al caso del átomo monoelectrónico, se reduce

precisamente a la ecuación de Schrödinger del átomo monoelectrónico en el límite donde ε se aproxima a cero, esto es, en el punto mínimo de la curva de energía ε.

[26] Véanse los casos de sistemas trielectrónicos, estados excitados y moléculas simples listados en el cuadro XIII.1.

SEXTA PARTE

LA QUÍMICA Y SUS HERRAMIENTAS DE REPRESENTACIÓN

XIV. HERRAMIENTAS VIRTUALES

Cuestiones epistemológicas y sociales del diseño de procesos químicos computarizado

ANN JOHNSON*

Computar o no computar.
He ahí el dilema.
¿Qué es más noble para el alma: soportar
las flechas y pedradas de la estocástica fortuna
o llevar los algoritmos a un mar de adversidades
y por la heurística resolverlos?

MALPAS, 1989, p. 599

INTRODUCCIÓN

Llama la atención contrastar las prácticas de trabajo de los ingenieros químicos en los años cincuenta con las de la actualidad. Aunque los ingenieros químicos de ambas épocas pueden dar descripciones igualmente vagas de su trabajo —por ejemplo, diseñar los procesos que "transforman materias primas en productos deseados" (Felder y Rousseau, 1986, p. 3)—, las maneras de realizarlo son muy distintas. Hoy en día muchos ingenieros químicos empiezan a usar programas de diseño computarizado desde la primera clase del primer curso de la carrera. Casi todos usan programas como el Matlab en las clases introductorias. Aunque algunos profesores les enseñan los métodos "manuales" que aprendieron en la era anterior a la computadora personal, a pocos estudiantes de especialidades de la ingeniería química se les ocurre resolver problemas sin la ayuda de una computadora. Como consecuencia de la ubicua computadora personal, las prácticas de trabajo del diseñador de procesos químicos han cambiado radicalmente, hasta el grado de que un hipotético ingeniero químico que despertara de un profundo sueño iniciado en 1960 sería tan incapaz de trabajar ahora como lo sería un recién graduado de remontarse a la época de la regla de cálculo e incorporarse enseguida a un equipo de diseño. Argumentaré aquí que esto constituye una inconmensurabilidad centrada en el mundo cotidiano de la práctica antes que en las esferas exclusivistas y esotéricas de la teoría. Por "prácticas" entiendo las actividades diarias o incluso por horas del ingeniero químico dedicado al diseño de procesos. Que un ingeniero químico se refiera a su trabajo como a diseño de procesos no le dice a alguien ajeno a la profesión nada de lo que hace durante ocho horas o más al día. Pensar en esto me recuerda algunos programas de televisión que he visto, donde unos niños pequeños explican cómo se ganan la vida sus padres. Aunque el hijo de una ingeniera química tal vez sepa decir que su mamá trabaja con productos químicos, sería muy interesante escuchar cómo concibe la tarea cotidiana del diseño de procesos. Me atrevería a decir que actualmente muchos hijos de ingenieros químicos equiparan la actividad de sus padres con el trabajo frente a una computadora, algo en lo que ninguno habría pensado en los años cincuenta y muy pocos en los sesenta. Hay aquí una lección importante para quienes estudiamos ciencias e ingeniería: el diseño puede discutirse con utilidad en un metanivel, pero éste se encuentra desvinculado del trabajo que realizan científicos e ingenieros. Esta distinción entre teoría y prácticas de trabajo es decisiva sobre todo en el estudio de la ciencia y la ingeniería en la industria, donde la cuantificación de todo y las teorías nuevas con frecuencia son subproductos. Como la química siempre ha tenido vínculos muy estrechos con la industria, y la inmensa mayoría de los químicos e ingenieros químicos trabajan en ésta, centrarse en el hacer es especialmente pertinente a la filosofía de la química. En consecuencia, lo que me interesa aquí es cómo se desarrollaron las herramientas y técnicas de diseño computarizado y cómo han transformado la labor del diseño de procesos de tal manera que el trabajo actualmente no es comparable al que se hacía en la era anterior a la ubicua computadora.

Aunque argumento que las computadoras han fomentado cambios importantes y significativos en las prácticas de trabajo de los ingenieros, con ello no quiero decir que

una fuerza tecnológica externa llamada "computadora" haya actuado sobre ingenieros químicos pasivos. Si bien el uso de la computadora cambió la manera de trabajar de los ingenieros químicos, dado su uso en dicha comunidad, ellos también cambiaron la ingeniería química y lo que las computadoras eran capaces de hacer, y participaron de la manera más profunda en una redefinición más amplia de lo que era la computadora.[1] Este ciclo de acción recíproca demuestra una manera de eliminar el engañoso determinismo que tiende a infiltrarse en cualquier relato sobre los modos en que han interactuado las computadoras y la sociedad.

El relato que quiero contar sobre la computadora y los procesos químicos trata de cómo tanto la computadora como las prácticas de la ingeniería química se han transformado recíprocamente en manos de agentes humanos. Ésta es hasta cierto punto la narración tradicional del desarrollo de la computadora; examinar este desarrollo a menudo requiere una mirada a las tablas balísticas que la ENIAC se concibió para producir, las cifras censuales que debía calcular la Univac o los problemas de física que había detrás de la MANIAC. Sin embargo, cuando la atención se desvía hacia las aplicaciones, antes que al desarrollo, de la computadora, parece surgir una voz más determinista. Quisiera poner desde ahora mismo las cartas sobre la mesa: rechazo la actitud determinista en todas sus formas.[2] Dicho lo anterior, este capítulo no será un relato simétrico del desarrollo conjunto de la computadora y su soporte lógico, y las prácticas de diseño de la ingeniería química, sino que se centrará de manera más marcada en la adopción de nuevos métodos computarizados para realizar el trabajo de diseño. La historia de la computación, sobre todo del soporte lógico —que es más pertinente a las preguntas que quiero plantear—, constituye un proyecto complejo que me apartaría demasiado del diseño de procesos químicos.

En el intento de entender lo que cambió a raíz de la adopción de técnicas computarizadas, es importante explorar la relación entre la epistemología de la ingeniería y las comunidades de ingenieros. Aunque discutiré esta relación desde la perspectiva de la ingeniería química, una dinámica parecida se aplica de varias formas a muy diversas clases de ingeniería y ciencia. Ante todo, la estructura social básica de los ingenieros es el grupo de investigación orientado a un problema, o lo que yo llamo "comunidad", un grupo íntimo con un interés investigativo común *muy específico*. Las comunidades de ingenieros de esta índole van desde poco más de una docena hasta varios centenares de miembros. Los aspectos decisivos que las caracterizan son la definición colectiva de su tema de investigación y el hecho de que todos se conocen entre sí, a veces por reputación o por intermediarios, pero más a menudo por contacto personal. Rara vez hay más de dos grados de separación entre dos de los integrantes de una comunidad. Así, ni una disciplina como la ingeniería química ni un subcampo como el diseño de procesos representan comunidades orientadas a un problema. La comunidad orientada a un problema que trato aquí es el grupo de ingenieros interesados en la utilización de la computadora como herramienta de diseño de procesos. Se preguntaban cómo hacer de ella una herramienta central de la ingeniería química para aumentar la velocidad, exactitud y complejidad de sus diseños. Una vez que lo consiguieron, pasaron adelante a otros asuntos: cómo resolver más y mayores problemas con las nuevas computadoras. A menudo, conforme el problema evolucionaba, también lo hacía la comunidad. En algún punto de este proceso evolutivo, el colectivo dejó de ser el grupo inicial: tenía muchos miembros nuevos y éstos hacían preguntas distintas. En el caso del diseño computarizado, la comunidad inicial se fragmentó en muchos más colectivos, por lo general divididos según los tipos de procesos que diseñaban. Esto es, el problema que vinculaba al principio a los integrantes de la comunidad dejó de ser un problema; por tanto, se identificaron problemas nuevos y se formaron nuevas comunidades. Como puede verse, la comunidad es un agregado muy fluido, siempre cambiante tanto en enfoque epistemológico como en composición. Por lo mismo, exige un examen histórico, pues observarla fija en el tiempo implicaría perder su cualidad más esencial.

Aunque una comunidad de investigación puede estar situada totalmente dentro de una disciplina, es más frecuente que las comunidades orientadas a un problema sean interdisciplinarias y multidisciplinarias. Como todos los profesionales se conocen entre sí, se rompen las fronteras disciplinares. Cuando una comunidad empieza a exceder este tamaño sumamente personal, a menudo empieza a fragmentarse. La fragmentación genera nuevas comunidades y supone el fin del grupo original.[3] Las actuales comunidades pueden y suelen traspasar fronteras nacionales y empresariales.[4]

Las comunidades de ingenieros evolucionan porque el conocimiento de la ingeniería evoluciona. Por tanto, separar los acuerdos sociales del conocimiento en torno al cual se forman suele dar por resultado descripciones inexactas de los aspectos tanto sociales como epistemológicos. Me gustaría, pues, primero presentar esquemáticamente la evolución de una comunidad de ingenieros, y después detallar el estudio de un caso que muestra el diseño de procesos computarizado como comunidad ejemplar. El estudio demostrará los problemas interrelacionados de las estructuras sociales y epistemológicas dentro de las comunidades de ingenieros y detallará estas etapas. Por último, quisiera mostrar cómo se desarrollaron prácticas inconmensurables de diseño de procesos durante la evolución comunitaria y epistemológica.

Tal vez sea obvio, pero un grupo de investigación orientado a un problema debe empezar por un problema. Para las comunidades de ingenieros el problema inicial suele plantearse con la pregunta "¿Cómo se hace…?" Desde el punto de vista histórico, muchos ingenieros de diferentes instituciones a menudo hacen tales preguntas a la vez por varias razones posibles. Puede haberse presentado una nueva demanda en el mercado, por ejemplo, a raíz de un cambio de la legislación.[5] En otros casos surge la oferta de un dispositivo de otro campo para su adaptación. Tal es el caso de la aplicación de la computadora, aunque, como subrayo en la introducción, no creo que se trate de una adopción completamente exógena. Un tercer motivo de que un problema se vuelva fundamental para la formación de una comunidad es una nueva promesa de resolver una dificultad existente; por ejemplo, un nuevo entendimiento científico de una enfermedad como impulso de un avance farmacéutico, o un nuevo fenómeno en el caso del desarrollo de instrumentos. Queda claro que es importante entender los motivos de la formación de cierta comunidad. Sin embargo, como éstos también son propios de cada estudio, una lista larga de motivos posibles sería inútil para fines esquemáticos.

Baste decir que por varias razones, en el curso de algunos años, grupos de ingenieros de diferentes instituciones empiezan a investigar un conjunto de temas prometedores, todos los cuales giran en torno a un solo problema definible: cómo hacer, determinar, prevenir, limpiar, mejorar, abaratar, etc. En conferencias y talleres profesionales de índole más amplia —por ejemplo, la reunión anual del American Institute of Chemical Engineers (AICHE)—, estos ingenieros se reúnen para indagar sus intereses comunes. Aunque estas reuniones iniciales pueden realizarse en contextos formales, como sesiones de lectura de trabajos, más a menudo son menos protocolarias; por ejemplo, conversaciones informales concertadas mediante conocidos mutuos. En estas reuniones informales se intercambia información o conocimiento nuevo. El intercambio de información en estos contextos informales es un aspecto fundamental de la formación de comunidades, pues la información que un posible miembro tiene y está dispuesto a revelar influye en la jerarquía de que gozará en la comunidad naciente. Equiparo esta etapa con un juego de póquer en el que se requiere una "apuesta inicial" de información antes de repartir las cartas. Entonces comienza una mano, en la que cada participante se

pregunta qué sabrán los demás y querrán comunicar. Ofrecer el propio conocimiento al grupo es una apuesta: ¿justificará la información recibida de los demás el conocimiento entregado? Estas preguntas suponen más que lograr un simple ascenso en la jerarquía. Como la mayoría de los ingenieros trabajan en el sector privado, entregar información puede tener consecuencias económicas serias. Sin embargo, no participar en el intercambio de conocimiento puede tener consecuencias aún más graves. Es una especie de economía moral, pero sería ingenuo soslayar la tahurería del momento.

Como los ingenieros saben a quién le interesa determinado problema o conjunto de problemas relacionados, también aprovechan recursos profesionales y organizan sesiones formales sobre su problema en conferencias más amplias. Esto les permite presentarse unos a otros y reclutar nuevos miembros de campos y problemas afines. En estas sesiones formales a menudo pulen la definición del problema y empiezan a delimitar conjuntos de soluciones: qué se puede considerar una solución y cuáles soluciones son inaceptables por tales o cuales razones, entre ellas factibilidad en determinada instalación industrial, costo, legislación, impacto ambiental, insumos, etc. A partir de estas sesiones en conferencias muy grandes, los miembros programan talleres más pequeños dedicados a su problema. Una vez realizados talleres y conferencias pequeños centrados en el problema, es posible decir con certeza que hay una comunidad, y por la lista de participantes se puede saber quién pertenece a ella. Durante la organización de estas reuniones algunas personas asumen un papel de liderazgo en la nueva comunidad y, dependiendo de su personalidad, suelen ser los mayores productores de conocimiento nuevo aplicable al problema.[6]

De manera irónica, precisamente en este momento de formación de una comunidad cohesionada suele aumentar la resistencia a la comunidad. Los miembros de las mayores organizaciones profesionales pueden negar la validez del problema de la comunidad o que éste pertenezca a la disciplina general. Por ejemplo, casi al mismo tiempo que los ingenieros químicos asistidos por computadora empezaron a sostener reuniones propias, sus artículos dejaron de abordar problemas más generales de ingeniería química. Se dieron cuenta de que necesitaban publicaciones periódicas propias, las cuales tenían distintas normas de calidad y, en este caso particular, publicaban algoritmos, programas y aplicaciones nuevas de programas existentes en el comercio, en vez de artículos metodológicos tradicionales.

Una vez que una comunidad sostiene reuniones propias y edita publicaciones periódicas o anuarios de interés especial, alcanza un estado de madurez, aunque todavía dinámico. Por irónico que parezca, en muchos casos éste es el principio del fin. Puede darse una de dos situaciones que suponen el fin. En muchos casos se soluciona el problema en torno al cual se formó la comunidad. Un signo de solución es un producto que se introduce en el mercado con éxito.[7] Con frecuencia la versión del producto de cierta empresa predomina en el mercado; es decir, se consigue “clausura” en torno a determinado artículo (Law, 1987, pp. 111-114; Misa, 1992, pp. 109-111). Los ingenieros que trabajan en otras empresas suelen reorientar sus esfuerzos para competir de manera más directa con el producto líder. Como la competencia de productos es tan intensa en

estas etapas finales, se anula toda tendencia hacia una comunidad intelectual: cada vez se gana menos intercambiando cualquier clase de conocimiento. Las patentes se imponen a partir de conversaciones informales y dibujos en servilletas de papel. A veces, lejos de que la competencia aniquile a la comunidad, ésta crece hasta el grado de dejar de funcionar como “cooperativa” de conocimiento; entonces se produce la fragmentación y se forman comunidades menores enfocadas en lo que eran subproblemas en la comunidad original. El ciclo de desarrollo de la comunidad vuelve a empezar. Sin embargo, es esencial señalar que el interés fundamental de una comunidad es su conocimiento; las cuestiones epistemológicas y sociales no difieren totalmente.

La química y la ingeniería química comparten muchas cualidades. Quizá, pues, no debería sorprender a nadie que la historia y la filosofía de estas dos disciplinas también compartan una característica dominante: que se estudian mucho menos que otras disciplinas. Aunque hay muchos más químicos que físicos en el mundo, la historia y la filosofía de la física eclipsan a la historia y la filosofía de la química. La ingeniería química ocupa una posición parecida, pero aún más ignorada. Hay más graduados de ingeniería química que de cualquier otra disciplina de la ingeniería, y sin embargo se dedica muy poca atención a la historia de la ingeniería química en comparación con las demás disciplinas de la ingeniería: civil, mecánica, eléctrica, incluso aeroespacial.[8] Dada la falta de atención a la historia de la ingeniería química, quizá algunas palabras sobre la ingeniería química y su relación histórica con la química sean útiles antes de pasar a mi discusión sobre el desarrollo del diseño de procesos computarizado.

La ingeniería química es la más joven de las cuatro principales disciplinas de la ingeniería, y tiene los nexos más estrechos con una disciplina científica. En consecuencia, es un buen ejemplo de cómo una disciplina se construyó deliberadamente para diferenciarse de otra. Buena parte de la historia de la ingeniería química se ha centrado en este primer periodo de formación disciplinar. Sin embargo, revisar este periodo no lleva a una descripción útil de las prácticas de la ingeniería química, porque en su forma primitiva, naciente, apenas empezaban a desarrollarse prácticas comunes; todavía no se alcanzaba el consenso. En los años veinte se había llegado a la unanimidad en cuanto a la naturaleza de la ingeniería química; en la industria se usaban y en las universidades se enseñaban prácticas comunes generalizables. Estas técnicas definitorias de una disciplina por lo general se sitúan en la categoría de operaciones unitarias, por las cuales la producción química se concebía como una serie de procesos físicos, como destilación, calentamiento y enfriamiento, cristalización, secado, filtración, etc.[9] Desarrollada en buena medida en el Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT), esta conceptualización de la ingeniería química se difundió en el libro de texto de Walker, Lewis y McAdams *Principles of Chemical Engineering*, publicado en 1923 *[Principios de ingeniería química*, Compañía Editorial Continental, México, 1967]. En el MIT, la ingeniería química se centraba en el diseño para la industria química: desde el diseño de fábricas y procesos hasta el control de la producción y los problemas de aumento de tamaño a ritmo fijo. La ingeniería química fue desde el principio abiertamente comercial, distinguible de la química por su orientación total hacia la producción química a gran escala.[10]

La ingeniería química en el MIT en los años veinte tenía un marcado, aunque quizá poco sofisticado, aspecto matemático, según el cual Walker, Lewis y McAdams escribieron que "en la medida de lo posible, el tratamiento es matemáticamente cuantitativo así como cualitativamente descriptivo" (Freshwater, 1989, p. 20). En los años treinta, la termodinámica aplicada empezó a cambiar el enfoque de la ingeniería química, y fue el siguiente paso en el proceso de imprimir mayor refinamiento a las

matemáticas de la disciplina. En la Universidad Purdue, en los años treinta, R. N. Shreve empezó a desviarse de la concepción física de los procesos hacia la concepción química al centrarse en los procesos unitarios además de las operaciones unitarias. Argumentó que la química industrial podía presentarse como una serie de procesos unitarios como alquilación, nitración, oxidación, sulfonación, etc. (Peppas, 1989, p. 129). Sin embargo, Shreve no pudo continuar la matematización de la disciplina usando procesos unitarios en este punto, y fue criticado por el enfoque mayormente descriptivo que adoptó en la materia (p. 141). En ingeniería química, como en muchas otras disciplinas científicas e ingenieriles a principios del siglo XX, la matematización llegó a ser el principal aspecto del avance.

La ingeniería química, guiada por Neal R. Amundson, de la Universidad de Minnesota, se volvió decididamente matemática en los años cincuenta. Amundson, cuyo doctorado era de hecho en matemáticas, llegó a ser director de la facultad de ingeniería química de esa universidad en 1949, cuando apenas tenía 33 años de edad. Su insólita formación matemática lo llevó a realizar un trabajo muy innovador en la transformación de la ingeniería química de disciplina experimental en analítica. Entrevistado en 1990, explicó así la dificultad para defender su tesis de maestría sobre una solución analítica del método de McCabe-Thiele: “Los ingenieros del comité no entendían realmente lo que yo estaba haciendo porque la ingeniería química no tenía casi nada de matemáticas. Era muy primitiva desde el punto de vista matemático. Es una de las cosas que cambié después” (Amundson, 1990, p. 14). Durante las dos décadas que siguieron, convirtió a esa facultad en la institución de vanguardia en la matematización de la ingeniería química (Amundson, 1990, p. 22). En los años sesenta otras facultades, a menudo guiadas por graduados de Minnesota, siguieron el ejemplo y priorizaron la construcción de nuevos modelos matemáticos cada vez más complicados. A la par que aumentaba la complejidad de las herramientas y los modelos matemáticos del ingeniero químico, crecían las probabilidades de que las computadoras facilitaran las soluciones matemáticas. Pueden verse fenómenos similares en otras disciplinas ingenieriles a mediados de los años cincuenta, conforme se generalizaban las soluciones iterativas y los métodos de matrices. En consecuencia, los métodos matemáticos de la ingeniería química maduraron al tiempo que se introducían la IBM 704 y su lenguaje de programación Fortran. Amundson se convirtió en uno de los principales proponentes del uso de la computadora en la ingeniería química, en gran medida porque incrementaba el refinamiento matemático que marca toda su trayectoria. La computadora era una herramienta matemática; entonces, les interesaba a Amundson, sus estudiantes y sus seguidores (Amundson, 1990, p. 30).

La matematización muy pronto afectó el plan de estudios de ingeniería química. Durante los años sesenta, el curso introductorio de la carrera en los Estados Unidos trató cada vez más del equilibrio de masa y energía. Este curso era inflexiblemente matemático y exigía conocimientos de cálculo como prerrequisito. También daba un lugar prominente al diseño de procesos en la formación de los ingenieros químicos, elevando así el rango de esta subespecialidad, que no obstante haber sido medular en la “construcción de la teoría” de la ingeniería química, no lo había sido en el plan de estudios de ingeniería química en la época anterior a la segunda Guerra Mundial. Al hacerlo, también destacaba el carácter matemático de la ingeniería química.

En su tesis doctoral Amundson investigó analíticamente el proceso de difusión, usando ecuaciones diferenciales parciales (EDP) no lineales, parabólicas. Como suele suceder, con su trabajo abrió un nuevo campo de investigación, y a principios de los años cincuenta se erigió en precursor del uso de computadoras, como las IBM 605 y 650, en la ingeniería química. A través de sus actividades de consultoría en Remington Rand, en 1956 la Universidad de Minnesota adquirió una Univac ERA 1103. Amundson decía que la máquina tenía dos conjuntos de usuarios: sus estudiantes de ingeniería química y "un miembro de la facultad de física"[11] (Amundson, 1990, p. 30). Bajo su dirección, el diseño de procesos se prestó particularmente bien a las aplicaciones de la computadora. Como los procesos se modelizaban matemáticamente, las computadoras eran útiles para resolver los complejos conjuntos de ecuaciones que caracterizaban el diseño de procesos, como los problemas de equilibrio de masa y energía. El uso peculiar que Amundson hacía de las EDP se prestaba a la aplicación de la computadora, ya que las EDP de más de dos variables tenían que "resolverse" mediante el uso de aproximaciones iterativas.[12]

Los cálculos iterativos de una computadora podían obtener aproximaciones muy precisas de EDP porque, mientras que los ingenieros iteraban una ecuación docenas de veces, una computadora podía hacerlo cientos de veces. A más iteraciones, más cercanas resultaban las aproximaciones. Los métodos iterativos no resolvían las EDP de manera analítica, pero daban a los ingenieros un alto grado de confianza en sus aproximaciones. Sin embargo, fuera de la Universidad de Minnesota el acceso de los ingenieros a las computadoras era muy limitado; eran pocas, y en la mayoría de las instituciones se priorizaba su empleo para investigaciones físicas relacionadas con la defensa. Sólo unos cuantos ingenieros químicos en grandes instituciones de investigación obtenían algún acceso a las computadoras. Quienes, como Amundson, lo obtenían, daban publicidad al potencial de la computadora para que las aproximaciones de las EDP fueran útiles y no dudosas.

Durante años los ingenieros habían evitado la construcción de modelos matemáticos dependientes de soluciones de EDP porque nunca entrarían en la práctica habitual; los modelos que no permitían soluciones numéricas eran inútiles; pero de pronto, a mediados de los años cincuenta, los modelos matemáticos inabordables dejaron de parecerlo tanto. En la segunda mitad de esa década los ingenieros químicos orientados a la modelización matemática reelaboraron los modelos para aprovechar la capacidad de la computadora para realizar aproximaciones iterativas. Tenían a su favor el hecho de que a menudo, cuando las facultades de física adquirían computadoras nuevas, más poderosas, las facultades de ingeniería se las arreglaban para heredar las computadoras viejas. Aunque esta etapa de la investigación académica fue necesaria, difícilmente puede decirse que haya modificado la práctica de la ingeniería química, pues la comunidad de ingenieros que trabajaba en cualquier rama computarizada de la disciplina sumaba menos de 20 personas en 1955.

Cuando los ingenieros químicos intentaron por primera vez el uso de la computadora para resolver ecuaciones, a menudo lo hicieron como si se tratara de una regla de cálculo, como una herramienta para ayudarse en el cómputo. Esto puede decirse sobre todo de los problemas que requerían aproximaciones iterativas; la computadora simplemente remplazaba al computador humano. Sin embargo, las computadoras analógicas de 1955 eran tan enormemente distintas de las computadoras de hoy que es fácil subestimar la dificultad de usarlas como simples calculadoras. Programar una IBM 701 o incluso una 704, que usaban el Fortran, exigía la intervención de un especialista, esto es, un programador. La sola escritura de secuencias cortas de instrucciones para resolver problemas de álgebra de matrices podía ser abrumadora. Por tanto, escribir un programa para resolver una matriz no era cosa sencilla; cuando los escribían ingenieros, solían volverse temas de artículos especializados. El uso de la computadora con frecuencia implicaba el trato con programadores. Aunque unos cuantos ingenieros químicos asumieron la tarea de aprender a programar antes de la difusión del Fortran en los planes de estudio de pregrado de ingeniería, los ingenieros en especialización rara vez estaban dispuestos a perder tiempo en el aprendizaje de la programación, que se consideraba un trabajo de oficina.[13] La programación causaba más problemas que los que resolvía, de manera que se encargaba a especialistas en computadoras externos o, más comúnmente, a estudiantes de posgrado.[14] En consecuencia, los programadores desempeñaron un papel cada vez más central en el desarrollo de la ingeniería química computarizada, porque solían aconsejar a los ingenieros cómo construir modelos matemáticos para lograr la máxima solubilidad. Pese a las actitudes con frecuencia despreciativas de algunos ingenieros, los programadores constituían una parte fundamental de la naciente comunidad de ingeniería química computarizada. A fines de los años sesenta, la programación se volvió una aptitud mucho más común entre los estudiantes de doctorado; hasta entonces, las preguntas sobre cómo programar siguieron siendo centrales para la comunidad de diseño de procesos computarizados.

Los ingenieros que trabajaban en aplicaciones informáticas a la ingeniería química se encontraban con la resistencia de otros ingenieros, a quienes les preocupaba que la computadora transfiriera el “pensamiento” ingenieril a la máquina o a quien la manejaba, el programador. Algunos ingenieros químicos temían que la computadora los hiciera obsoletos, sobre todo porque se hablaba del diseño automatizado como el “santo grial” de la ingeniería computarizada.[15] En última instancia, los ingenieros químicos se preguntaban cómo iban a retener la propiedad de su disciplina, enfrentándose con tres opciones. Primero, podían negar el potencial de la computadora, pero los años cincuenta no eran simplemente un momento histórico en el que se pudiera negar el potencial de la computadora. Los físicos ya habían garantizado la importancia científica de las aplicaciones, y aun de las simulaciones, informáticas. Todas las disciplinas científicas e ingenieriles avanzaban hacia las aplicaciones de la computadora; si el AICHE hubiera sancionado la duda en su investigación, habría sido tanto como negar el rango científico

de la profesión. En segundo lugar, los ingenieros químicos podían tratar de incorporar a los programadores a su comunidad. Las grandes empresas de productos químicos solían abordar el problema de este modo e intentaban integrar sus departamentos de apoyo informático como socios cooperativos que realizaban un trabajo, no de oficina, sino técnico. La tercera opción parecía la más complicada y requería el mayor cambio en el campo de la ingeniería química: ciertas adaptaciones del plan de estudios podían convertir a los ingenieros químicos en programadores. Como el Fortran llegó a ser el lenguaje de programación general de la ingeniería, se fue generalizando cada vez más el requisito de que los estudiantes de posgrado, entonces todavía en pregrado, lo aprendieran lo antes posible. El Fortran acabó por convertirse en un requisito *de facto* para graduarse como ingeniero químico. Al llegar los años sesenta la profesión de la ingeniería química había definido su relación con la programación, facilitada por un lenguaje general como el Fortran; los ingenieros *se habían vuelto* programadores.[16]

El resultado de esta primera fase del uso que los programadores hicieron de la computadora fue el mapeo en ella de las prácticas del ingeniero químico de entonces. El proceso de mapeo estuvo teñido por el hecho de que los primeros preconizadores de la computadora estaban orientados a las matemáticas, de manera que las prácticas mapeadas con frecuencia eran las de la vanguardia matemática y no necesariamente las prácticas generales de la profesión. Además, como las capacidades de la computadora se iban determinando sobre la marcha, los ingenieros no forzosamente sabían cuál era la mejor manera de usar la máquina. Con frecuencia tomaban sus métodos preexistentes y simplemente ponían a las computadoras a "procesar" los números; aún no sabían que debían replantear las tareas para sacar el mayor provecho de la máquina.[17] Los ingenieros químicos de los años cincuenta usaban la computadora para hacer lo que ya podían hacer sin ella, si bien con menos rapidez y complejidad. Todavía no cambiaban sus esquemas para lograr que la máquina hiciera algo que ellos no podían realizar con sus métodos "manuales".

En el periodo comprendido entre fines de los años cuarenta y principios de los sesenta, los ingenieros químicos hallaron por primera vez en la computadora un posible aliado en su construcción de un conjunto más riguroso de modelos matemáticos. En ese entonces, un pequeño grupo de ingenieros, la mayoría de los cuales había formado parte de la facultad de ingeniería química de la Universidad de Minnesota, reorientó sus esfuerzos de la construcción de modelos al trabajo de diseño computarizado. En este primer periodo el diseño computarizado implicaba encontrar la manera de usar esta herramienta para producir soluciones numéricas de modelos que tenían demasiadas variables para iterarlas a mano. Al ver la capacidad de la máquina para procesar enormes cantidades de números, comprendieron que las viejas reglas de lo que constituía un modelo soluble ya no eran válidas. Podían diseñar modelos de mucha mayor complejidad matemática y dejar que la computadora hiciera cientos y hasta miles de iteraciones para hallar una solución. Resolver EDP ya no planteaba obstáculos insuperables; de hecho, estos ingenieros empezaron a construir modelos con un número creciente de EDP, ya que los métodos de aproximación de la computadora eran lo bastante buenos para dar soluciones. Así, en los años cincuenta se formó un nuevo grupo de ingenieros en torno a un nuevo conjunto de problemas: cómo usar mejor la computadora y cómo reorganizar los modelos matemáticos para optimizar las soluciones obtenidas por los cálculos de la máquina. Tanto el proceso de responder estas preguntas como las propias respuestas constituyeron el nuevo conocimiento cuya propiedad reclamaba esta nueva comunidad de ingenieros.

Los años sesenta: creación de nuevas prácticas

En los años sesenta el desarrollo de nuevas herramientas computarizadas estuvo dominado por la investigación industrial, no por la académica. En el movimiento por hacer de la ingeniería química computarizada una práctica de trabajo efectiva sobresalían egresados de posgrado que habían cursado planes de estudio de fuerte orientación matemática. En las dos siguientes secciones revisaré dos importantes sistemas de diseño de procesos de estado constante desarrollados en los años sesenta. Estos programas, y docenas más como ellos, cambiaron radicalmente la práctica de la ingeniería química realizada a partir de los años cincuenta. Para producir estos nuevos programas, los ingenieros al principio se enfrentaron al problema planteado por el uso inicial de las computadoras como calculadoras de EDP. El aprovechamiento cabal de la capacidad de la computadora requería una actitud distinta hacia la realización de modelos matemáticos. Los modelos tenían que incorporar la capacidad iterativa de la informática —tenían que orientarse hacia los métodos de matrices y de diferencias finitas—. En otras palabras, los ingenieros químicos tenían que apartarse de las nociones tradicionales de elegancia y aceptar la fuerza bruta calculatoria de la computadora.

En 1961, ingenieros químicos de Monsanto empezaron a programar secuencias de instrucciones informáticas en Fortran para resolver problemas de equilibrio de materiales y energía (Cobb, 1972, p. 32). Les llevó cuatro años producir suficientes bloques para construir un sistema de diseño con estas piezas. Ingenieros y programadores diseñaron desde el principio estos bloques con capacidad para modelizar procesos enteros en combinación. En 1965 los ingenieros empezaron a usar el sistema, llamado Flowtran, para diseñar nuevos procesos y nuevas fábricas. Con este sistema un ingeniero podía especificar una serie de condiciones iniciales de materiales y energía, y cierta secuencia de operaciones unitarias. Entonces el programa generaba una salida de información de materiales y energía (Gallier, 1972, p. 4). El sistema residía físicamente en una computadora CDC-6600 de United Computing Systems, en las instalaciones de Monsanto en Kansas City. Los ingenieros de otras instalaciones de la empresa tenían acceso al sistema por medio de una modalidad de procesamiento por lotes a distancia. En 1972 el Flowtran procesaba 200 trabajos a la semana (Cobb, 1972, p. 36).

A diferencia del uso de la computadora como calculadora por los académicos de los años cincuenta, el Flowtran de Monsanto *simulaba* procesos químicos. Sin embargo, la simulación en 1965 era burda. C. B. Cobb, ingeniero que se dedicaba a comercializar el Flowtran entre usuarios ajenos a Monsanto, describió lo que eso suponía para quien usaba el sistema: "Los simuladores hoy por hoy no son la clase de herramienta con la que se hace una pregunta, se oprime un botón y sale la respuesta. No es así en absoluto. Esta caja negra contiene un modelo matemático, y para hacerlo trabajar a nuestro favor hay que saber de qué se trata" (p. 33). Después Cobb explicó que "afinar" el modelo exigía mucha experiencia tanto en el uso del sistema como en el diseño de procesos.

Cobb afirmaba que la misma simulación cambió la práctica de la ingeniería química, pero descartó expresamente la preocupación de los críticos de que la ingeniería química computarizada eliminaría el pensamiento ingenieril. Si se consideran las prácticas de trabajo cotidiano de los ingenieros que usaban el Flowtran, no cabe duda de que habían cambiado. Debían construir un diagrama de flujo para usar la computadora, pero la manera en que funciona el Flowtran dictaba por completo la construcción de operaciones y condiciones iniciales del diagrama. Antes, la lógica del diagrama de flujo no habría dependido del modo en que los programadores de los bloques definieran los procesos. Los ingenieros tenían que tomar distintas decisiones en sus procesos de diseño. Necesitaban meses de adiestramiento formal en el uso del Flowtran para diseñar procesos con él. La práctica diaria en Monsanto en 1970 era muy distinta que en 1960.

Los ingenieros químicos de la Universidad Purdue y del Dartmouth College entablaron relaciones de colaboración en 1960. Al año siguiente, con el Fortran II, lograron los comienzos de un programa de diseño computarizado llamado Process and Case Evaluator Routine (PACER) [secuencia evaluadora de casos y procesos]. Era un conjunto de módulos de Fortran con una secuencia ejecutora de capacidad rastreadora. En 1966 el programa se había distribuido a las facultades de ingeniería química. En 1967 el código del PACER se reescribió totalmente para convertirse en un paquete comercial de soporte lógico llamado PACER 245. Aunque el modo operativo del nuevo PACER era similar, se trataba en realidad de un programa totalmente distinto. Se estableció la Digital Systems Corporation en Hanover, New Hampshire, para vender el PACER 245 como aplicación comercial y dar servicio y mantenimiento a los usuarios.

Como programa, el PACER 245 tenía tres elementos (Shannon, 1972, p. 34). Primero, una secuencia ejecutora procesaba la información de entrada y de salida, y la contabilidad de la computadora. Aunque este elemento estaba oculto al usuario, no era en modo alguno trivial. Desde el punto de vista de la programación, era la función más complicada. Una biblioteca de cálculos de operaciones unitarias estandarizadas llamadas *compublocs* constituía el segundo elemento. Los *compublocs* eran modelos matemáticos discretos de operaciones unitarias, a menudo desarrollados a partir de las pequeñas secuencias de soluciones generadas en los años cincuenta en computadoras analógicas. El PACER 245 tenía 165 *compublocs*. El tercer elemento era una segunda biblioteca de datos y secuencias de propiedades físicas.

Los ingenieros que usaban el sistema tenían que concebir sus diseños de varias maneras para aprovechar mejor las capacidades del PACER 245. Shannon, principal portavoz del sistema y uno de sus diseñadores desde el principio, aconsejaba a los ingenieros "empezar con diseños simples" (p. 34). A partir de una simulación simple de equilibrio de masa, los ingenieros podían construir modelos de creciente tamaño, concatenando cada vez más procesos y agregando más materiales. El diseño de una fábrica necesitaba no un único modelo complicado, sino una serie de modelos de complejidad creciente. El ingeniero podía luego determinar lo que funcionaba en aislamiento en el modelo; los módulos podían optimizarse de uno en uno. El ingeniero sabía en cada etapa que todo funcionaba hasta cierto punto: los modelos eran funcionales y exactos hasta ese punto. Al igual que el sistema Flowtran, éste supuso una práctica de trabajo un tanto diferente con respecto a la época de antes de la computadora. No obstante, si hay algún "método" ingenieril común, es dividir los problemas en pasos discretos y abordar éstos separadamente; la computadora reiteró la práctica de descomponer el problema en unidades discretas. Además, en la computadora el ingeniero reelaboraba el paso anterior al llegar a su juntura con el siguiente, técnica que sería mucho menos común en los métodos manuales por el trabajo que implicaba. Este problema también mostró lo interrelacionados que estaban en realidad los módulos del PACER. Cada paso nuevo debía tener en cuenta los anteriores; iniciar el proceso a la mitad

entrañaba un riesgo serio de errores emergentes. Aunque las pulsaciones de teclas del PACER diferían totalmente de las del Flowtran, Shannon y Cobb coincidían en que se necesitaba una actitud mental similar para usar la simulación en general. Esta actitud hacia el diseño de procesos debía enseñarse, o bien en la empresa o bien, de preferencia, en la universidad. El adiestramiento en el PACER duraba seis meses desde la primera introducción hasta el punto en que el ingeniero estaba preparado para diseñar el primer sistema (p. 37). Shannon calculó que PACER tardaría dos años en permear el departamento de diseño de procesos de una empresa. El adiestramiento era uno de los servicios que prestaba Digital Systems. Además, una empresa podía contratar a Digital Systems para diseñar una fábrica conjuntamente con sus ingenieros de diseño de procesos como medio para aprender el sistema. Después del diseño en colaboración, se podía alquilar el PACER al cliente para uso interno.

El PACER quizá haya sido el programa de diseño de procesos más comúnmente usado en los años sesenta y principios de los setenta debido a su prevalencia en universidades y a su accesibilidad para las empresas pequeñas. Aun así, Shannon señaló en la conferencia de 1972 que sólo un porcentaje mínimo de diseñadores de procesos usaban la computadora, en su mayoría los de empresas grandes con sistemas diseñados internamente. Aunque había varios paquetes de programas para empresas menores que no podían construir ni dar mantenimiento a soportes lógicos propios, el uso de cualquier sistema también suponía comprar tiempo de conexión con un servidor, servicio cuyo costo a menudo excedía el presupuesto de una empresa pequeña. Además, el costo del PACER no era cualquier cosa. Digital Systems cobraba un sobreprecio de 50% sobre el costo del tiempo de conexión con el servidor, de manera que si dicho costo era de mil dólares, el PACER costaba quinientos. Las prácticas ya estaban cambiando, pero todavía no para la mayoría de los ingenieros.

En 1970 la mayoría de las grandes empresas químicas tenían alguna clase de soporte lógico para el diseño de procesos, y casi todas las universidades con centros de investigación usaban algún paquete de programas de diseño de procesos en la enseñanza de estudiantes de grado. Se escribieron docenas y aun centenares de tesis de maestría para introducir, o bien un nuevo sistema de diseño de procesos, o bien un nuevo conjunto de subsecuencias en un paquete existente. El diseño computarizado se había arraigado en la ingeniería química, y los problemas relacionados con el diseño de procesos computarizado ocupaban un lugar central en una comunidad funcional. Conforme se generalizaban los paquetes de programas y se establecían las prácticas, la comunidad empezó a fragmentarse y a abordar una diversidad de temas que presuponían la existencia de un soporte lógico funcional, preciso y útil de diseño.

Uno de los temas que desde el principio se derivaron de la comunidad de diseño de procesos era el nuevo problema de cómo formar a los estudiantes de grado de ingeniería química de manera que estuvieran preparados profesionalmente para el uso del diseño computarizado. En 1970 los estudiantes de grado que habían cursado un plan de estudios de ingeniería química tenían un conocimiento limitado del diseño computarizado. A principios de los años setenta la mayoría de ellos no tenían experiencia, y la de quienes sí la tenían rara vez bastaba para incorporarse a uno de los departamentos de diseño de procesos de las grandes empresas. El conocimiento del Fortran apenas empezaba a exigirse a los ingenieros aún no graduados. Seider (1972, p. 179), de la Universidad de Pensilvania, lamentaba que aunque los libros de texto incluían programas informáticos, “a menudo los programas aparecen hacia el final del texto, después de los temas que se presentan tradicionalmente; el programa de computadora es una consideración tardía. Creo que se debería presentar el tema de manera más lógica para garantizar que los programas informáticos demuestren principios en el momento oportuno”. Había que hacer de las aplicaciones informáticas parte integral de los planes de estudios de ingeniería química, proceso que llevó tiempo y exigiría avances tecnológicos aún por venir, como la computadora personal.

Todos los ingenieros químicos que se reunieron en el primer taller del AICHE sobre informática en la ingeniería química en 1972 coincidieron en que la informática estaba cambiando el campo de la ingeniería química. E. H. Blum, de la Rand Corporation, lo dijo de la manera más contundente:

> Estoy muy impresionado y creo sin reserva en los comentarios del profesor Seider sobre el hecho de que la computadora ha cambiado radicalmente el modo en que los ingenieros químicos conciben los problemas. La manera fundamental de pensar en problemas estequiométricos es distinta; la manera de pensar en cálculos de equilibrio es distinta […] La manera de pensar en problemas de cinética y ritmos de reacción debería ser distinta […] ¿Pero cómo se enseña a la gente a pensar de manera distinta en los problemas? [Blum, 1972, p. 186].

Seider contestó:

> El modo como pensamos en un problema está influido en cierta medida por la manera en que planeamos resolverlo […] Dado un problema, la pregunta es ¿cómo lo resolveríamos? Pues si es en el área del equilibrio de materiales y energía, empezamos por escribir las ecuaciones de conservación. Entonces, queda la pregunta de cómo resolver el conjunto de ecuaciones. Antes, muchos problemas se enmarcaban de tal manera que podían resolverse con métodos expeditivos, los métodos de operaciones unitarias. Hoy en día la computadora ofrece más flexibilidad en la modelización y la solución de ecuaciones. Por lo mismo, podemos evitar la necesidad de emplear métodos semiempíricos que a veces resultan incómodos e inexactos [Seider, 1972, p. 186].

Los ingenieros químicos que se valían de la computadora tenían algunas respuestas a las preguntas que conformaban su comunidad. Habían establecido una agenda para las vías de desarrollo futuro más prometedoras. Sin embargo, el carácter de las preguntas que se hacía la comunidad exigía la participación de un segmento mucho mayor de la disciplina. Lo que la ingeniería computarizada necesitaba en los años setenta era una nueva generación de ingenieros, formados en un plan de estudios que los preparase desde el principio en ingeniería computarizada y concediera un puesto central a las computadoras.

Las cuestiones tecnológicas acompañaban a la necesidad de más estudiantes preparados para diseñar procesos en una computadora. La minicomputadora estaba llegando a la mayoría de edad, lo que prometía hacer más accesible la informática tanto a los planes de estudios de ingeniería química de las universidades pequeñas como a las empresas pequeñas. Según Seider, una minicomputadora capaz de ejecutar programas de simulación de procesos costaba entre 20 000 y 40 000 dólares en 1972 (Seider, 1972, p. 181). Aunque la microcomputadora de los años ochenta tendría una influencia mucho mayor por lo que toca a difundir el uso de la computadora en las prácticas de todo ingeniero químico, la minicomputadora facilitó la generalización de la ingeniería computarizada en gran parte de los ingenieros de diseño de procesos a fines de los años

setenta.

Como tan elegantemente expone Peter Galison en *Image and Logic* y lo trata aún más directamente en su artículo "Computer Simulations and the Trading Zone", la computadora inició su interacción con las comunidades científicas como herramienta, pero pronto desarrolló una relación mucho más complicada con ellas. De hecho, es difícil hallar una designación de lo que llegó a ser la computadora que por sí sola exprese la complejidad de su papel en el desarrollo de la ciencia y la ingeniería de la posguerra. Galison afirma que el uso de la computadora obligó a los físicos a desafiar las definiciones y la relación tradicionales entre teoría y experimentación (Galison, 1996, p. 119). En el caso de la ingeniería química, la computadora desempeñó un papel igualmente complicado y también desdibujó las fronteras epistemológicas y sociales tradicionales. Sin embargo, no es preciso discutir las relaciones tradicionales entre teoría y experimentación, ya que ésta no es una dicotomía útil en ingeniería. Antes bien, la computadora en ingeniería química desafía la relación entre la modelización matemática y la metodología de diseño.

En los años cincuenta el análisis numérico de modelos matemáticos predominó cada vez más en el trabajo del ingeniero químico. Para calcular equilibrios de masa y energía era necesario manejar grandes cantidades de ecuaciones a fin de hallar alguna manera de obtener soluciones o aproximaciones de valores críticos. La entrada de la informática en la ingeniería química asumió la necesidad de encontrar soluciones numéricas para estas ecuaciones y asignó la tarea a una máquina. Los ingenieros reorientaron entonces su trabajo a dos áreas: cómo reorganizar el proceso de diseño para aprovechar al máximo la capacidad de procesamiento de números de la computadora, y cómo diseñar modelos matemáticos integrados en caja negra al soporte lógico de la computadora.

La relación entre la práctica de la modelización y la del diseño es fundamental tanto en la epistemología como en el ejercicio de la ingeniería. La mayoría de los historiadores y filósofos del diseño han coincidido en que la actividad del diseño es uno de los principales generadores, si no el principal, de nuevo conocimiento ingenieril. El diseño en ingeniería suele requerir que el mundo físico se exprese como un conjunto de relaciones matemáticas a fin de proporcionar una vía de análisis; esto es, requiere la construcción de modelos. En consecuencia, la relación dialéctica entre modelización y diseño ocupa un sitio medular en la epistemología de la ingeniería, de manera parecida a la relación más tradicional entre teoría y experimentación en el conocimiento científico. En su artículo "Models and Mediating Instruments", Morgan y Morrison argumentan: "La capacidad de los modelos teórico-matemáticos para funcionar como instrumentos de diseño procede del hecho de que proporcionan la clase de información que nos permite intervenir en el mundo" (Morgan y Morrison, 1999, p. 23). Sin embargo, en el caso del diseño computarizado, se requiere otro nivel de análisis, ya que la computadora, al igual que el modelo matemático, funciona como instrumento de diseño. Además, el diseño por computadora no sólo dio ímpetu a la construcción de modelos nuevos, sino que cambió las maneras en que se usaban los modelos preexistentes. La computadora alteró la

relación entre la práctica de la modelización y la del diseño integrando en una caja negra el cálculo de la solución. Como afirmó Warren Seider en el taller de 1972 del AICHE, la razón por la que los ingenieros químicos en ese año tenían que pensar de otra manera era que trabajaban de otra manera, como indicaban los nuevos métodos y, en particular, los nuevos "atajos" que permitía el uso de la computadora (Seider, 1972, p. 186). Diseñar un nuevo proceso llegó a entenderse como una actividad distinta, que exigía un cuerpo cambiante de conocimiento. El trabajo del ingeniero, lo que hacía día tras día, era diferente con la computadora que con lápiz y papel, fueran o no fueran nuevos los algoritmos mismos.

Los practicantes de la ingeniería química computarizada argumentaban que en 1970 sus herramientas de soporte lógico eran tan sofisticadas que hacían falta meses e incluso años de reeducación para usarlas siquiera en la simulación de los procesos más triviales. El requerimiento de tanto adiestramiento especializado mostraba que las viejas y las nuevas prácticas del diseño de procesos distaban un mundo. Un ingeniero formado antes de 1960 no habría podido incorporarse a un departamento de diseño de procesos en 1975 y ocuparse de un proyecto.[18] Es precisamente la necesidad de reeducación lo que implica prácticas abismalmente distintas. Los ingenieros de 1960 y 1975 no son intercambiables: no saben ni hacen lo mismo. Se podría argumentar incluso que no entienden los procesos de la misma manera porque la experiencia de calcular es muy distinta. Esto constituye inconmensurabilidad, pero en cuanto a las prácticas de trabajo, no a la teoría.

Los filósofos de la ciencia que escriben sobre inconmensurabilidad suelen centrarse en el papel de la teoría. Thomas Kuhn, cuya noción de cambio de paradigmas es fundamental en toda discusión de la inconmensurabilidad, veía las teorías nuevas como generadoras de inconmensurabilidad. La inconmensurabilidad se produjo cuando las nuevas teorías cambiaron tanto las preguntas que los científicos hacían, como las respuestas que aceptaban (Kuhn, 1970, p. 148). Además, Kuhn aclaró que los proponentes de teorías diferentes hablan idiomas diferentes, "expresando compromisos cognitivos diferentes, apropiados para mundos diferentes" (Kuhn, 1977, p. xxiii). Sin embargo, la inconmensurabilidad entre la ingeniería química antes de la informática y el diseño computarizado es de otra naturaleza, pues lo que cambia no es la teoría, sino la práctica. Es difícil aplicar las ideas de Kuhn a este cambio de la ingeniería porque la teoría tiene una influencia pequeña, si no nula. Como argumenta Walter Vincenti en *What Engineers Know…*, las teorías no son de importancia capital para el diseño ingenieril. En cambio, las herramientas teóricas sí lo son, porque las herramientas están orientadas a la práctica; esto es, lo que los ingenieros hacen (Vincenti, 1994, pp. 213-216).

Desde la publicación de *The Structure of Scientific Revolutions*, varios filósofos de la ciencia han ampliado la mirada de Kuhn a las dimensiones más sociales de la ciencia. Esta línea de pensamiento sitúa a la teoría como una sola dimensión de las muchas de que está compuesta la ciencia en cuanto actividad y en cuanto conocimiento. Según estas líneas, si la ciencia está construida en múltiples dimensiones, quizá entonces la inconmensurabilidad sea consecuencia de dimensiones que no son la teoría. La expresión de Ian Hacking "inconmensurabilidad tópica", aunque se aplicó a la teoría en *Representing and Intervening…*, también es válida en el caso de la inconmensurabilidad de las prácticas ingenieriles (Hacking, 1983, p. 68). La inconmensurabilidad tópica se produce cuando una nueva teoría, o en este caso una nueva práctica, cumple "tareas distintas" que la anterior. La nueva práctica produce una salida diferente de información que, en ingeniería, puede ser una actividad de mayor importancia epistemológica que la construcción de teorías. Además, Hacking capta el sentido de inconmensurabilidad de la

práctica cuando escribe: “A los estudiantes de una generación posterior, formados en T*, T puede parecerles ininteligible hasta que hacen el papel de historiadores e intérpretes y reaprenden T desde cero” (Hacking, 1983, p. 69). Si se sustituye la T de Hacking por “práctica ingenieril”, entonces esta declaración expresa exactamente lo que ocurrió cuando la computadora llegó a ser la herramienta primordial en el diseño de procesos químicos.

Ronald Giere también aborda la inconmensurabilidad de modos que iluminan el cambio a la computadora en ingeniería química. Escribe que una variedad de inconmensurabilidad, tomada de Kuhn, es la inconmensurabilidad de las normas, según la cual los ejemplares kuhnianos ayudan a determinar lo que se aceptará como problemas y soluciones significativos (Kuhn, 1970, p. 148; Giere, 1988, p. 37). Explica escribiendo: “Se sigue que una solución nueva a un problema, la cual recurre a un nuevo ejemplar y viola así las normas de la tradición investigativa anterior, no podría ser reconocida como solución por esa tradición” (Giere, 1988, p. 37). La noción de Giere de tradición investigativa, con sus connotaciones kuhnianas, capta el cambio de la ingeniería química sin recurrir a las teorías como generadoras primarias del cambio.[19] En otras palabras, la investigación de la inconmensurabilidad desde la filosofía de la ciencia puede describir adecuadamente el cambio epistemológico que ocurre con la introducción de la computadora en el diseño de procesos químicos, siempre y cuando la teoría no sea el único vector de este cambio de visión del mundo.

CONCLUSIÓN

En la época que siguió inmediatamente a la segunda Guerra Mundial, la ingeniería química académica, al igual que casi todas las demás disciplinas ingenieriles, se centró en la construcción de modelos matemáticos y herramientas cada vez más sofisticados. ¿Habrá sido sólo una coincidencia fortuita que al mismo tiempo los físicos, matemáticos e ingenieros electrónicos desarrollaran la computadora para resolver precisamente la clase de matemáticas que los ingenieros químicos diseñaban dentro de sus nuevos modelos y herramientas? Creo que esto exagera la contingencia de esta historia. Antes bien, quizá los años cincuenta fuesen un momento de sinergia en que el Departamento de Defensa y el gasto militar de los Estados Unidos impulsaban la investigación científica e ingenieril por el mismo camino. Cuando en 1952 se introdujo la IBM 701, el gasto militar había hecho de la computadora una herramienta factible. A fines de los años cincuenta, cuando se introdujeron la IBM 704 y el Fortran, las industrias ingenieriles se convirtieron en uno de los principales mercados de la computadora. Aunque el primer destinatario de la informática de gran velocidad era la industria de defensa, las empresas químicas no perdieron mucho tiempo investigando el potencial de la informática para su trabajo de investigación y desarrollo. Primero los estudiantes de posgrado, pero después incluso los de grado, tras cursar los planes de estudios de gran orientación matemática, encontraron grandes oportunidades para seguir trabajando en la comunidad de la ingeniería química computarizada. Así, los ingenieros químicos de la industria y las universidades colaboraron para producir hacia 1970 un nuevo conjunto de prácticas de trabajo en diseño de procesos.

BIBLIOGRAFÍA

Akera, A., *Calculating a Natural World: Scientists, Engineers and the Computer in the United States, 1937-1968,* tesis doctoral, Universidad de Pensilvania, 1998.

Amundson, N. R., entrevista concedida a James J. Bohning (24 de octubre), transcripción de Chemical Heritage Foundation, Filadelfia, Pensilvania, 1990.

Blum, E. H., "Where Lies the Future of Chemical Engineering Computing?", discusión de panel, transcrita en *Chemical Engineering Computing*, vol. 2, American Institute for Chemical Engineering, Nueva York, 1972.

Cobb, C. B., "Computer-Aided Chemical Process Design", discusión de panel, transcrita en *Chemical Engineering Computing*, vol. 1, American Institute for Chemical Engineering, Nueva York, 1972.

Ensmenger, N. L., *From "Black Art" to Industrial Discipline: The Software Crisis and the Management of Programmers*, tesis doctoral, Universidad de Pensilvania, 2001.

Felder, R., y R. Rousseau, *Elementary Principles of Chemical Processes*, 2ª ed., John Wiley and Sons, Nueva York, 1986.

Forsythe, G. E., y P. C. Rosenbloom, *Numerical Analysis and Partial Differential Equations*, John Wiley and Sons, Nueva York, 1958.

Freshwater, D. C., "The Development of Chemical Engineering as Shown by its Texts", en N. Peppas (ed.), *100 Years of Chemical Engineering*, Kluwer, Dordrecht, 1989.

Galison, P., "Computer Simulations and the Trading Zone", en P. Galison y D. Stump (eds.), *The Disunity of Science*, Stanford University Press, Stanford, California, 1996.

Gallier, P., "Chemical Engineering Computing: Where the Action Is", discusión de panel, transcrita en *Chemical Engineering Computing*, vol. 1, American Institute for Chemical Engineering, Nueva York, 1972.

Giere, R. N., *Explaining Science*, University of Chicago Press, Chicago, 1988.

Hacking, I., *Representing and Intervening: Introductory Topics in the Philosophy of Natural Science*, Cambridge University Press, Cambridge, 1983.

Kuhn, T., *The Structure of Scientific Revolutions*, 2ª ed., University of Chicago Press, Chicago, 1970 [versión en español: *La estructura de las revoluciones científicas*, 3ª ed., FCE, México, 2006].

———, *The Essential Tension*, University of Chicago Press, Chicago, 1977.

Law, J., "Technology and Heterogeneous Engineering: The Case of Portuguese Expansion", en W. Bijker, T. Hughes y T. Pinch (eds.), *The Social Construction of Technological Systems*, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1987.

Mahoney, M. S., "In Our Own Image: Creating the Computer", en I. Stamius, T. Koetsier y K. de Pater (eds.), *The Changing Image of the Sciences*, Kluwer, Dordrecht, 2002.

Malpas, R., "Invited Address to the Conference", en *Foundations of Computer-Aided Process Design*, vol. II, Engineering Foundation, Nueva York, 1989.

Misa, T., "Controversy and Closure in Technological Change", en W, Bijker y J. Law (eds.), *Shaping Technology/Building Society*, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1992.

Morgan, M. S., y M. Morrison, *Models as Mediators: Perspectives on Natural and Social Science*, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.

Peppas, N., "Academic Connections of the Twentieth Century U. S. Chemical Engineers", en N. Peppas (ed.), *100 Years of Chemical Engineering*, Kluwer, Dordrecht, 1989.

Seider, W. D., “Where Lies the Future of Chemical Engineering Computing?”, discusión de panel, transcrita en *Chemical Engineering Computing*, vol. 2, American Institute for Chemical Engineering, Nueva York, 1972.

Shannon, P. T., “Computer-Aided Analysis and Design Packages”, discusión de panel, transcrita en *Chemical Engineering Computing*, vol. 1, American Institute for Chemical Engineering, Nueva York, 1972.

Smith, M. R., y L. Marx (eds.), *Does Technology Drive History? The Dilemma of Technological Determinism*, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1994.

Vincenti, W., *What Engineers Know and How They Know it*, Johns Hopkins University Press, Baltimore, 1994.

---

[*] Departamentos de Historia y Filosofía, Universidad de Carolina del Sur.

[1] Véase Mahoney, 2002.

[2] Por “determinista” entiendo aquí un argumento como “A causa de la computadora se desarrollaron las prácticas de la ingeniería química o, para ser más precisos, *tuvieron que desarrollarse* de la siguiente manera”. Un argumento de esta forma presenta dos problemas. En primer lugar, implica que las prácticas de la ingeniería química no podrían haberse desarrollado sino de la manera como lo hicieron; en este tipo de argumento queda poco margen para contingencias. Por el contrario, hubo múltiples maneras en que los ingenieros químicos reaccionaron a la existencia de la computadora, y al echar una mirada a varias subdisciplinas ingenieriles se ve la variedad de reacciones disciplinares posibles. El segundo problema del determinismo ingenuo es que vuelve exógeno al agente causal; esto es, la computadora *actúa sobre* los ingenieros químicos. Este problema se resuelve reconociendo el círculo de acción recíproca entre el desarrollo de la computadora (sobre todo el soporte lógico) y las cambiantes prácticas de diseño. Véase una interesante discusión del problema historiográfico del determinismo tecnológico en Smith y Marx, 1994.

[3] Dicho lo anterior, es indudable que los ingenieros pueden y suelen ser miembros de más de una comunidad al mismo tiempo. De hecho, creo que éste es un aspecto fundamental de la profesión ingenieril, ya que el conocimiento nuevo con frecuencia procede de la transferencia de ideas y cosas desde otras comunidades. Los ingenieros deben tener identidades comunitarias múltiples para poner conocimiento nuevo (en el que se incluyen nuevos dispositivos) a disposición del grupo.

[4] Sin duda, en algunos casos la comunidad está contenida en una sola empresa o institución, a menudo por razones de seguridad, aunque en otros lo que la contiene es el carácter de propiedad intelectual de la investigación. Aun así, creo que estos últimos casos son excepcionales, y argumentaría que por lo general las comunidades de ingenieros traspasan fronteras nacionales e instituciones sociales como son empresas y universidades.

[5] Los casos más evidentes de esto serían las especificaciones de seguridad y los requisitos de protección ambiental que actualmente se exigen.

[6] Desde luego, hay incontables maneras de definir la cualidad de mayores productores.

[7] No obstante, los ingenieros con frecuencia siguen desarrollando el producto para mejorarlo o hacerlo más competitivo frente a otras opciones disponibles en el mercado. Aun así, los problemas de un producto de segunda o posterior generación suelen ser muy distintos y plantear dificultades de producción en serie —costo, velocidad de fabricación, opciones de materiales— e incluso de venta y distribución.

[8] Sin embargo, el AICHE no es la mayor sociedad profesional de ingenieros del mundo; tal distinción corresponde al IEEE (de ingeniería eléctrica y electrónica).

[9] Desde luego, muchos historiadores también han visto los comienzos o antecedentes de las operaciones

unitarias antes de que en 1915 Arthur D. Little acuñara la expresión.

[10] Con esto no se quiere decir que las demás disciplinas ingenieriles no tuvieran orientación comercial. Sin embargo, con las posibles excepciones de la ingeniería de minas y la aeroespacial, que son mucho más pequeñas y menos diferenciadas, a las otras disciplinas no se las identificaba tan estrechamente con una industria única, aunque multifacética.

[11] Este físico era el ganador del Premio Nobel William Lipscomb.

[12] No es lo mismo *resolver* una EDP que obtener una solución numérica. La mayoría de las EDP no se pueden analizar, por lo que son técnicamente irresolubles. Sin embargo, es posible introducir números que representan variables de una EDP y calcular los rangos en que se encontrarán las soluciones; esto es, pueden iterarse. Cuantas más veces se iteran, menores resultan los rangos, hasta que quedan reducidos a valores numéricos únicos. Se trata de soluciones aproximadas. Aun así, el número de iteraciones crece de manera exponencial conforme se agregan variables, por lo que desde el punto de vista práctico los métodos iterativos no son factibles para las EDP de más de dos variables. La obra de Forsythe y Rosenbloom (1958) es un libro de texto de la época sobre el uso de métodos numéricos para iterar EDP a mano.

[13] El paso de la programación de trabajo de oficina a profesión es un cambio histórico importante que se produjo precisamente al mismo tiempo que las nuevas aplicaciones de la computadora a la ingeniería. La manera en que la programación llegó a definirse como actividad y como profesión naciente es tema de varios artículos y dos recientes disertaciones. Véanse Ensmenger, 2001, y Akera, 1998.

[14] La actitud de los ingenieros hacia la programación suele ser contradictoria. Aunque a menudo defendían su decisión de no aprenderla alegando que era demasiado trabajo, también les gustaba minimizar su legitimidad académica y verla como un mero servicio. Cuando los ingenieros escribían programas, merecían largas descripciones en las publicaciones especializadas, pero cuando eran programadores quienes los escribían, sólo estaban haciendo bien su trabajo.

[15] El diseño automatizado era el concepto de que al introducir las condiciones iniciales o *inputs* de un proceso en una computadora, ésta podría calcular iterativamente las combinaciones óptimas de materiales, energía y operaciones y procesos unitarios. Si el proceso se cumpliera cabalmente (lo que no ha ocurrido), entonces el ingeniero químico se convertiría en un simple operario introductor de datos.

[16] Esto no significa que ningún programador trabajara en las industrias químicas. Por el contrario, había muchos. Sin embargo, en los años sesenta trabajaban con ingenieros que ya tenían una formación y competencia importantes en programación. Los ingenieros determinaban lo que los programadores, a menudo llamados especialistas, programaban. Lo mismo puede decirse desde la perspectiva del campo en desarrollo de la programación informática; véase la nota 14, *supra*.

[17] Agradezco a Michael S. Mahoney la noción de “replantear la tarea”. Esta expresión se refiere a muchos adelantos en la historia de la tecnología y por lo general significa encontrar la manera más eficiente de que una máquina haga algo, en vez de diseñarla para que imite las acciones humanas. La demostración más sencilla del replanteamiento de una tarea es pensar cómo pone una persona un tornillo con un destornillador a diferencia de cómo lo hace un taladro de mano. Diseñar una herramienta para que emule la acción humana supondría una herramienta que sólo puede girar 180° como la muñeca, en vez de 360° como un taladro.

[18] Se podría argumentar que la misma diferencia abismal entre prácticas existe entre el ingeniero de 1975, habituado al tiempo compartido, las tarjetas perforadas, los monitores 80 × 80 y las lecturas numéricas, y el ingeniero de hoy, con computadoras personales discretas, DVD con capacidad para 4.7 gigabytes de información, interfaces gráficas de usuario e impresiones láser de gráficas a todo color. Sin embargo, yo argumentaría que

estas tecnologías requieren menos reorganización del proceso de diseño —los modos en que los proyectos se descomponen en partes para su solución— que el paso de la falta de computadoras a los sistemas de los años setenta. Sin duda ha cambiado la naturaleza del trabajo, pero me parece que el cambio de la visión del mundo es menos profundo; las matemáticas todavía se encuentran en cajas negras de soporte lógico, y el análisis de diseños anterior a la informática es bastante similar. Por otra parte, si este hipotético ingeniero que viaja por el tiempo es diseñador de tecnología informática, ese mundo ha variado tanto entre 1975 y 1995 como entre 1955 y 1975.

[19] Dicho lo anterior, la noción de Giere de las teorías como familias o cúmulos de modelos puede funcionar en ingeniería como no lo hacen las explicaciones con mayor contenido proposicional de las teorías. Véase Giere, 1988.

XV. EL ESPACIO EN LA REPRESENTACIÓN MOLECULAR, O CÓMO REPRESENTAN OBJETOS LAS IMÁGENES

S. H. VOLLMER[*]

UNO DE LOS primeros sistemas de representación en química para mostrar relaciones espaciales dentro de las moléculas fue el sistema de diagramas moleculares de Dalton. En él se usaban agrupaciones de círculos para representar moléculas. Los círculos en sí representaban átomos y, cuando había más de un átomo en una molécula, las posiciones de unos círculos con respecto a otros indicaban las relaciones espaciales que, en opinión de Dalton, podían prevalecer entre los átomos, o la geometría de la molécula. El contacto entre las circunferencias de los círculos de estos diagramas representaba las afinidades entre los átomos.

Los diagramas de Dalton eran revolucionarios en su tiempo debido a la correspondencia espacial directa entre las posiciones relativas de los círculos en el papel y las posiciones relativas de los átomos en la molécula representada. En este capítulo la sección "Diagramas de Dalton" explica el sistema de dicho autor y muestra cómo tal clase de representación difiere de otras, como las fórmulas químicas de Berzelius.

Todas las posiciones de los átomos de una molécula representadas en el sistema de Dalton son coplanarias y, por tanto, una descripción de cómo sus diagramas moleculares representan relaciones espaciales por compartir geometrías con las moléculas mostradas es una descripción de la representación de objetos bidimensionales (o de un aspecto bidimensional de objetos tridimensionales). Por geometría entendemos en este capítulo las posiciones relativas de puntos y no las distancias absolutas entre ellos: las distancias entre los círculos difieren de las distancias reales entre los átomos en una medida exorbitante, un factor de alrededor de 10^8.

La sección "Representación de la tercera dimensión" explica cómo la descripción puede extenderse a la representación de objetos tridimensionales porque, si bien no es posible expresar cabalmente la geometría de un objeto tridimensional con una representación plana, sí se puede expresar un componente de ella: su geometría en dos dimensiones. Un componente más, propongo, puede representarse tal como se proyecta en la retina del ojo en la percepción. Mi análisis del modo en que se representan los objetos mostrando sus geometrías plantea, pues, la pregunta de si esta propiedad —expresar una geometría— es lo que hace de la representación de un objeto una imagen de él. En la sección "Signos gráficos" se propone una descripción de la representación gráfica. En esta descripción, cuando la representación de un objeto expresa una geometría en dos dimensiones del objeto, es un dibujo de él, y cuando hay una tercera dimensión del objeto, en la representación suele estar codificada como se codifica en la percepción visual. Toda regla tiene excepciones, y señalo las excepciones debidas a desviaciones que se producen cuando el objeto representado es muy grande o está muy cerca.

Mi descripción se opone a la de los semióticos que argumentan que los dibujos no

comparten ninguna propiedad con aquello que representan (p. ej., Eco, 1976) o que, si comparten una geometría, lo es en sentido metafórico (p. ej., Peirce, 1938). Mi descripción difiere de las descripciones más recientes de estetas que aseguran que un objeto y su imagen se parecen entre sí porque comparten una fenomenología. Por ejemplo, se dice que experimentamos los dos como semejantes en forma, y ésta se define en relación con el ángulo sólido que los trazos o el objeto subtienden al ojo (Hopkins, 2003). Propongo que un dibujo y el objeto al que representa comparten más que una fenomenología. Comparten una propiedad en dos dimensiones, la geometría, y en la tercera, la propiedad está codificada en el dibujo generalmente como se codifica en la retina durante la percepción. Mientras que descripciones anteriores se centran en la fenomenología de los dibujos y proponen por qué se *experimentan* como semejantes un dibujo y su objeto, la descripción que se da aquí explica por qué *son* semejantes.

La sección "Las imágenes en el arte" explica las dificultades que surgen cuando una descripción de la representación gráfica se amplía desde la consideración de objetos científicos a objetos representados en el arte. La sección "Representación de moléculas" vuelve a la representación de relaciones espaciales entre átomos señalando cómo, en sistemas de representación molecular posteriores a la época de Dalton, las relaciones espaciales entre átomos a veces se mostraban de maneras que eran, según la descripción que se da en este capítulo, gráficas, como ocurre con las representaciones de Van't Hoff de las geometrías de los átomos de carbono mediante tetraedros sólidos. Más tarde se desarrollaron métodos esquemáticos de representación espacial, como la proyección de Fischer, que volvió convencional la representación de relaciones espaciales.

Parecería que este capítulo presupone que las representaciones de los átomos se relacionan, pero no necesariamente es así (véase la sección "Las imágenes en el arte"). Entre los argumentos de que en efecto se relacionan se incluye el de que las observaciones cristalográficas de moléculas por rayos X ofrecen una clase de acceso epistémico parecido al de la observación ordinaria. Así, si los términos ordinarios se relacionan, las representaciones y geometrías de los átomos también pueden relacionarse (Vollmer, 2000; véase, también, Vollmer, 2003). Una comparación de aspectos de la representación molecular fuera de la geometría, como las diversas maneras en que pueden representarse las afinidades o fuerzas entre los átomos, está más allá del alcance de este capítulo.

Cuando un sistema de representación molecular muestra a las moléculas como conjuntos de representaciones de átomos, dado que hay distintas clases de átomos, la presencia de cada una de las cuales se confirma, en cualquier caso dado, por uno o más métodos experimentales, se necesitan diversos símbolos de los átomos en los diagramas, uno por cada clase de átomo. El sistema de Dalton asignó figuras y letras a modo de nombres de manera más o menos arbitraria. En los diagramas, Dalton colocaba cada símbolo de clase atómica dentro de un círculo que representaba un átomo de esa clase.

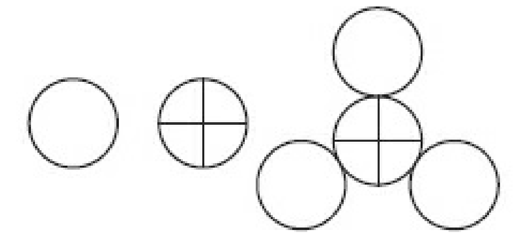


FIGURA XV.1. Símbolos de Dalton de un átomo de oxígeno y uno de azufre, y de una molécula de trióxido de azufre o ácido sulfúrico (hacia 1814).

Aunque en la época de Dalton se sabía poco sobre las posiciones relativas de los átomos en las moléculas, él decidió representar esas posiciones; más adelante, en la sección "Representación de moléculas", volveremos al fundamento de las posiciones específicas que eligió. Dalton representó las posiciones mostrando las colocaciones o geometrías relativas de círculos en el papel. Por ejemplo, la geometría del trióxido de azufre se expresó mostrando las posiciones relativas de tres círculos colocados en los vértices de un triángulo equilátero, y uno más en el centro. Los tres círculos representaban el oxígeno, y el cuarto, el azufre (figura XV.1).

Además de representar los átomos de que consta una molécula, la clase a la que cada uno pertenece, sus afinidades con otros átomos y sus relaciones espaciales interatómicas, es posible que en sus diagramas Dalton se haya propuesto mostrar otra propiedad de las moléculas; quizá las circunferencias de los círculos representaran las fronteras exteriores de los átomos. De ser así, cabe preguntar si representaban los centros duros que Dalton pensaba que tenían los átomos, o el calórico, o atmósferas de calor de los átomos. Si era el calórico, no representaban su tamaño preciso. Los círculos eran uniformes en tamaño, mientras que el calórico, según la descripción de Dalton, difería en tamaño de acuerdo con la clase de átomo. Si cada circunferencia en efecto representaba la frontera exterior de un átomo, puede interpretarse que cada una muestra una sección transversal de una propiedad distribuida esféricamente. Otra posibilidad habría sido representar la esfera del átomo con círculos sombreados que mostraran las esferas o, lo que resultaría menos práctico, con esferas reales, sobresaliendo cada una de sus mitades a cada lado del diagrama.

A juzgar por como las mostró en sus diagramas, las especulaciones de Dalton sobre las

formas de las moléculas se limitaban a dos dimensiones. Así, las posiciones de los átomos de las moléculas representadas eran, en todos los casos, coplanarias. No había, pues, necesidad de mostrar una tercera dimensión, dado que las posiciones relativas estaban representadas directamente por la coplanariedad de los círculos en la página. La geometría de las posiciones de los círculos en estos diagramas, por tanto, era compartida por la geometría de las posiciones de los átomos de la molécula representada.

O S (S + 3O)

FIGURA XV.2. Símbolos de Berzelius del oxígeno, el azufre y el trióxido de azufre o ácido sulfúrico (hacia 1820).

En contraste con el sistema de Dalton, el de Berzelius —que lo antecedió y es la base de la representación de compuestos químicos por fórmula molecular empleada hoy— representa las moléculas listando los símbolos de los átomos uno a continuación del otro (figura xv.2). Los símbolos de los elementos usados en estas fórmulas son las iniciales de sus nombres latinos. Cuando dos nombres tienen la misma inicial, la mayúscula del primero se asigna a uno, por lo general un no metal, y la mayúscula seguida de una minúscula al otro, casi siempre un metal. Como símbolo del fósforo *(phosphorus*), por ejemplo, se usa P, y del plomo *(plumbum*), Pb. Estos símbolos difieren de los usados en sistemas de representación anteriores; son letras comunes, y no símbolos exclusivos de la química, lo que en opinión de Berzelius facilitaba su escritura.

En este sistema, un volumen de un elemento, más tarde un átomo, se representaba con una letra o un par de letras. Cuando había más de un átomo de una clase dada, el número total de átomos de cada clase se mostraba, en las fórmulas originales, con un número, que se escribía o bien precediendo al término del elemento o bien a continuación como exponente, como en C^2H^5O para simbolizar el alcohol etílico en una época en que se subestimaba la cantidad de hidrógeno presente en la molécula. Cabe señalar que cuando Berzelius creó las fórmulas, los métodos cuantitativos eran mucho menos fidedignos que los métodos para determinar qué clases de átomos estaban presentes. Una dificultad importante de los primeros es que los métodos analíticos para medir los volúmenes de los gases evolucionaron y, antes de la época de Avogadro, había incertidumbre en cuanto a si todos los gases en las mismas condiciones de temperatura y presión contenían el mismo número de átomos por unidad de volumen, o si variaban y los gases combustibles, como H_2 y O_2, contenían la mitad que los demás (Szabadváry, 1966, p. 140). No fue hasta una vez aceptadas las teorías de Avogadro cuando las cifras empezaron a ser confiables.

Las clases de términos de una fórmula berzeliana se corresponden una a una con las clases de átomos de la sustancia representada. Cuando en una fórmula berzeliana no hay números, entonces cada término representa un átomo distinto y los términos mismos se corresponden uno a uno con los átomos representados. Hay quienes han propuesto que esta correspondencia uno a uno da carácter gráfico a estas representaciones, es decir, que son imágenes de las sustancias representadas (véase Klein *et al.*, 2003; véase, también, Klein, 2001).

Sin embargo, las listas comunes suelen estar en correspondencia uno a uno con las distintas partes de lo que se representa, como ocurre, por ejemplo, con una lista de los estados de un país o de los artículos que se compran en el supermercado. Por tanto, si la correspondencia uno a uno que la fórmula berzeliana muestra bastara para hacer de ella una imagen de la sustancia representada, una lista común (y quizá algunas oraciones) sería también gráfica; pero no solemos pensar en una lista común como imagen.

Los diagramas de Dalton también presentan una correspondencia uno a uno entre los átomos y sus representaciones, la cual, como los diagramas no usan números, siempre está presente. Resulta interesante que los diagramas de Dalton parecen ser indiscutiblemente imágenes de las moléculas que representan, a diferencia de las fórmulas berzelianas. Una propiedad notable de los diagramas de Dalton, más o menos ausente de las fórmulas berzelianas, es que muestran las relaciones espaciales, o geometrías, de las moléculas representadas. Por tanto, quizá mostrar geometría sea una propiedad necesaria para que un diagrama molecular sea una imagen. Si es así, para evaluar si las fórmulas berzelianas pueden considerarse en parte imágenes, debemos preguntar si pueden mostrar en parte geometrías.

Una fórmula berzeliana no puede mostrar la geometría completa de las posiciones de los átomos de una molécula porque está restringida a la línea en que se escribe. Sin embargo, puede representar parcialmente la geometría molecular mediante las posiciones de los símbolos de los elementos en una dimensión. Así, si los átomos están ordenados en una fórmula de manera que concuerden, hasta cierto punto, con sus relaciones espaciales, la fórmula puede ser, según la descripción propuesta, gráfica en parte (si ser gráfico puede ser cuestión de grado). Las fórmulas berzelianas, de hecho, se escriben a veces en múltiples partes o como listas colocadas lado a lado. En las fórmulas originales, cada una de las partes mostraba uno de los componentes en los que la molécula representada podía transformarse, presentando, como se ha dicho, un aspecto de la asociación interna de la sustancia representada (Klein *et al*., 2003). Según la descripción de imagen recién propuesta, en la que mostrar la geometría es una propiedad necesaria, si lo que las listas separadas espacialmente muestran de la asociación interna de la sustancia son las relaciones espaciales de los átomos y por ende su geometría —o algo acerca de su geometría—, entonces estas fórmulas pueden ser en parte gráficas.

Como se explicó antes, un diagrama puede compartir directamente una propiedad, su geometría, con el objeto que representa cuando lo que representa es plano, como ocurre con las posiciones relativas de átomos coplanarios.

Esta sección muestra cómo, también en el caso de objetos tridimensionales, la geometría de dos dimensiones del objeto puede compartirse con la geometría de su representación. Desde luego, la geometría de la tercera dimensión del objeto, que corresponde a una dirección perpendicular al plano de la representación, no puede compartirse también, porque la representación no tiene tercera dimensión. Esto significa que, aunque las dos primeras dimensiones del objeto pueden representarse en el plano de la representación por medio de una correspondencia espacial directa, se necesita una técnica para mostrar la geometría de la tercera dimensión del objeto, esto es, para presentar algunas de sus partes *como si* estuvieran más cerca y otras más lejos del observador. Por ejemplo, en una fotografía común, la representación de la tercera dimensión está codificada por su sesgo en el plano de la representación, tal como se forma en la retina en la percepción.

En las representaciones que forman los lentes ordinarios, lo que se muestra es la geometría de la refracción variable de la luz, por lo general en la superficie del objeto. Para evaluar tales imágenes, considérese, primero, un objeto aproximadamente plano. Cuando el objeto se coloca paralelo al lente, se forma una imagen suya a partir de la luz que cada punto (x, y) del objeto emite, donde x y y abarcan la superficie del objeto. La imagen se forma como consecuencia de los cambios de dirección de la luz causados por el lente, y la luz emitida por cada punto (x, y) del objeto converge en un punto correspondiente $(-x, -y)$ del plano de la imagen, donde $-x$ y $-y$ abarcan la superficie de la imagen. Hay, pues, una correspondencia uno a uno entre los puntos del objeto que emiten la luz y los puntos en que converge la luz en la imagen. Esta correspondencia explica la semejanza entre un objeto plano paralelo a un lente y su imagen.

Cambiemos ahora el objeto plano por uno tridimensional, o por un objeto que varía en la tercera dimensión, z. La luz emitida desde cada punto (x, y, z) del objeto converge ahora en un punto correspondiente $(-x, -y)$ del plano de la imagen y los puntos de emisión del objeto ya no corresponden uno a uno con los puntos de la imagen. La dimensión z, pues, está sesgada, o proyectada sobre el plano $-x$, $-y$.

Esto explica cómo, en las fotografías y en la imagen en la retina, la dimensión z de cada punto del que parte la luz desde un objeto se pierde en su imagen, a menos que sea sugerido por una indicación de la profundidad. La imagen se designa entonces proyección del objeto o proyección en perspectiva. Es una proyección del objeto según se ve desde cierto punto, el centro de la proyección, sobre un plano. La información sobre la tercera dimensión, que se recuerda como indicación de la profundidad, posibilita que un perceptor como nosotros decodifique la información por lo demás degenerada de la imagen, tal como la decodificamos en la percepción visual, para ver la geometría de la tercera dimensión del objeto que produjo la imagen.

El que dos dimensiones de una representación se compartan con el objeto y la tercera se sesgue en el plano de la representación ayuda a explicar cómo un objeto, por ejemplo un plato, tiene una proyección en perspectiva que varía entre circular y elíptica según el ángulo desde el cual se vea. Cuando el plano del plato es paralelo al plano del lente, y la proyección circular, las dos dimensiones del plato que comparten una geometría con la proyección son descritas por dos ejes en el plano del plato. Cuando el plato se ve desde otro ángulo y la proyección es, por ejemplo, elíptica, la geometría del plato con arreglo a otro par de ejes se comparte con la geometría de la proyección.

Una consecuencia importante del sesgo de la representación de la tercera dimensión en el plano de su imagen proyectada en perspectiva es que una imagen formada por luz emitida desde una imagen de un objeto puede ser aproximadamente la misma que la imagen formada por luz emitida desde el objeto mismo. Esto explica por qué las figuras de luz que la retina recibe de una fotografía u otra proyección en perspectiva pueden ser casi idénticas a las figuras que recibe del propio objeto. También explica por qué la imagen de una imagen puede parecer la misma que el original y en consecuencia por qué, cuando se sostiene la caja de un producto en la que hay una imagen de alguien que sostiene una caja del mismo producto, en ella una imagen similar, y así sucesivamente, la persona real que sostiene la caja y cada una de las imágenes parecen iguales en todos aspectos, menos en tamaño.

Podría objetarse que la experiencia que se tiene de la caja al verla con ambos ojos difiere de la que se tiene al verla con uno solo; sin embargo, la experiencia de la imagen no difiere. De hecho, al ver un objeto con ambos ojos, las dos imágenes, una vista por cada ojo, difieren ligeramente —unos 3°— en sus perspectivas del objeto. En consecuencia, cada una lleva una información ligeramente distinta sobre la geometría del objeto, y juntas producen una experiencia de percepción de la profundidad muy superior a aquella debida a la indicación de la profundidad mencionada. Al ver una imagen, sin embargo, como la tercera dimensión del objeto está sesgada, casi toda la información que puede recibirse sobre el objeto es recibida por un solo ojo y el segundo no aporta información adicional. Por tanto, cuando en este capítulo se dice que la imagen de un objeto puede producir una experiencia idéntica a la producida por el objeto, lo que se quiere decir es que la experiencia que se tiene al ver el objeto con un ojo puede producir una experiencia idéntica a la que se tiene al ver su imagen.

La experiencia de ver un objeto a veces difiere de la de ver su imagen, por otra razón. A veces la técnica de visualización usada no puede reproducir sino de manera aproximada la fina estructura de la superficie del objeto, como ocurre, por ejemplo, con una fotografía de grano grueso, o un cuadro con pinceladas visibles o pequeños puntos de color. Esta aproximación impone límites a la experiencia misma producida al ver el objeto y al ver su representación. Independientemente de cuánto puedan diferir en consecuencia las experiencias de ver, la manera habitual de representar el objeto es mostrar su geometría.

Como ya se dijo, cuando se representa un objeto lo que se representa es, de manera más específica, la geometría de la refracción variable de la luz. Esto puede decirse

incluso de objetos extraordinariamente pequeños, como las moléculas, cuando se representa la refracción variable, no de la luz común, sino de una radiación electromagnética de longitud de onda extraordinariamente pequeña, o rayos X. En ocasiones, la geometría de un objeto se conoce de una manera que no implica en absoluto la reflexión de radiación electromagnética, sino alguna otra propiedad, como la conductancia eléctrica que se mide en la microscopía de barrido de efecto túnel cuando una punta afilada se acerca a un átomo u otro objeto (a una distancia de alrededor de 1 nm). Las representaciones de los objetos se construyen desde las coordenadas en las que se produce la conductancia. En estas representaciones las geometrías de los objetos suelen mostrarse *como si* la propiedad observada fuera una propiedad de reflexión enfocada por un lente, esto es, la geometría en dos dimensiones de cada objeto se comparte con su imagen y la tercera dimensión se codifica más o menos como ocurre en la percepción.

Se podría objetar que una proyección en perspectiva de un objeto común y corriente no es una representación de la geometría del objeto, porque lo que se muestra no es sino una pequeña parte de su geometría. Esto se debe a que los objetos rara vez son transparentes. Cuando lo son, como en el caso de una medusa, podemos en efecto ver toda la envoltura de la superficie del objeto desde un solo punto de vista, o casi. La geometría en dos dimensiones de la representación del objeto es, pues, la geometría de todo el objeto, aproximadamente. En la mayoría de los casos, sin embargo, lo que se representa no es más que la geometría de la parte del objeto que es visible desde el punto desde el cual éste se observa. Así, cuando en este capítulo se dice que la geometría en dos dimensiones de un objeto se comparte con su representación, lo que se quiere decir es que la geometría de la parte del objeto que es visible se comparte en dos dimensiones con su representación. Como hay muchos puntos distintos desde los cuales puede hacerse una representación, cada uno de los cuales suele presentar una geometría diferente, hay una gran diversidad de geometrías, cada una de las cuales puede representar el objeto compartiendo una geometría con él.

Hay excepciones a la regla de que un objeto comparte su geometría en dos dimensiones con su proyección en perspectiva. Las excepciones surgen porque la regla general de que la geometría de un objeto en dos dimensiones es la misma que la geometría de una fotografía o una imagen en la retina sólo es, de hecho, aproximada. Lo anterior se debe a que, conforme las paralelas se alejan del observador, convergen en puntos infinitos de desaparición y la geometría se distorsiona. La regla general es una buena aproximación en muchas condiciones, si no en la mayoría. Se considera una buena aproximación cuando el objeto es lo bastante pequeño en relación con el campo "visual" o se encuentra lo bastante alejado para subtender una parte limitada de ese campo. Se dice que un objeto que subtiende ≤30° no sufre distorsión en su geometría (Earle, 1989). También se considera una buena aproximación cuando el objeto no se pierde de vista a lo lejos como unas vías de tren y, por tanto, ninguna de sus partes se representa mucho más cerca del punto de desaparición que cualquier otra parte.

Los signos que representan objetos a veces son lingüísticos. "Triángulo", por ejemplo, representa, desde el punto de vista lingüístico, los triángulos o la triangularidad. Esta palabra, como la mayoría de las palabras, no tiene propiedades particulares en común con los objetos que representa. Por tanto, para dar a entender su significado, la palabra depende enteramente de la convención. Entre las excepciones a esta regla se cuentan los pictogramas chinos, que tienen las formas de los objetos que representan, y las palabras del antiguo sánscrito, de las que se dice que tienen los sonidos de los objetos que representan.

Muchos piensan que las imágenes representan objetos de un modo no enteramente convencional. Curiosamente, las propiedades por las cuales las imágenes representan objetos son una cuestión sobre la cual hay poco acuerdo. Según algunas descripciones, una imagen y aquello de lo que es imagen no tienen propiedades en común (véase, p. ej., Eco, 1976). Según otras, no está claro si tienen propiedades en común y, si las tienen, tampoco está claro si es por estas propiedades comunes por lo que la representación es una imagen (p. ej., Goodman, 1976).

Descripciones más recientes proponen que lo que un objeto y su imagen tal como se presentan en el campo visual tienen en común es que *se experimentan como semejantes en forma* (Peacocke, 1987; véase, también, Lopes, 1996); alternativamente, lo que tienen en común es la propiedad de *experimentarse como semejantes en silueta*, donde ésta se define en relación con el ángulo sólido que los trazos o el objeto subtienden al ojo (Hopkins, 2003; véanse, también, Hopkins, 1998a y 1998b). Estas descripciones proponen, pues, que es por el modo en que se *experimenta* por lo que una imagen se parece a los objetos que representa. La descripción que se ofrece en este capítulo difiere de estas descripciones en que explica que un objeto y su representación tienen más en común que una fenomenología. Comparten ciertos aspectos de geometría y es por estos aspectos compartidos por lo que un perceptor como nosotros los experimenta como semejantes.

Una representación de un triángulo que muestre sus lados y ángulos y las relaciones entre ellos es, como los diagramas de Dalton, indiscutiblemente gráfica. La imagen del triángulo muestra las relaciones que los lados y ángulos guardan entre sí; los lados (o las longitudes relativas de los lados) y los ángulos del dibujo son los mismos que los del triángulo. La geometría es, pues, una propiedad que la imagen del triángulo tiene en común con el triángulo, esto es, el triángulo y su imagen comparten una geometría.

Parecería entonces que la geometría es una propiedad que los objetos bidimensionales (o un aspecto bidimensional de los objetos tridimensionales) comparten con sus imágenes. Otros ejemplos de representaciones de la ciencia que comparten una geometría con lo que representan son los dibujos de las constelaciones, cada uno de los cuales comparte una geometría con la constelación que representa (pero no con las estrellas), y los dibujos de ondas sinusoidales, que comparten sus geometrías con las ondas bidimensionales o con aspectos bidimensionales de las ondas tridimensionales que

representan. En cada caso, el hecho de que la representación tenga la misma geometría que su objeto la hace parecerse a él o producir una experiencia semejante a la que se tendría al verlo, si el objeto, o sólo ese aspecto suyo, pudiera verse. Es razonable suponer no sólo que estas representaciones, como los dibujos de triángulos, son imágenes, sino que son imágenes porque muestran geometrías, o que mostrar la geometría del objeto representado basta para que una representación sea una imagen. Si, como se propone en la sección "Los diagramas de Dalton", una representación de un objeto bidimensional (o de un aspecto bidimensional de un objeto tridimensional) que *no* muestra una geometría no es, por tanto, una imagen del objeto, entonces compartir una geometría con el objeto representado puede ser una condición necesaria y suficiente para que un diagrama de un objeto bidimensional sea una imagen de él.

¿De qué manera, pues, podría extenderse a las tres dimensiones esta descripción de cómo representan las imágenes? Esto es, ¿qué puede decirse sobre una imagen cuando lo que representa son, las más de las veces, tres dimensiones de un objeto tridimensional? Como se muestra en la sección "Representación de la tercera dimensión", cuando se representa un objeto tridimensional, dos dimensiones de su geometría pueden seguir compartiéndose con la geometría de su representación. La geometría del plano x, y, paralelo al plano de una representación, puede compartirse con el objeto, y la representación de la tercera dimensión puede codificarse por lo regular tal como en la percepción. Partiendo del caso bidimensional, entonces, esta representación también es una imagen del objeto.

Estos dos componentes —las dos dimensiones que comparten una geometría con dos dimensiones del objeto y la tercera, que está sesgada y representada, por ejemplo, por una indicación de la profundidad— determinan conjuntamente la manera en que el objeto se representa en una imagen y, por ende, el modo en que se experimenta cuando se ve la imagen. Volviendo al ejemplo del plato, cuando el plano del plato es paralelo al plano de la retina, las dos dimensiones del plato que comparten una geometría con su proyección corren a lo largo de los ejes del plano del plato. Cada coordenada z del anillo exterior de la circunferencia es, pues, más o menos idéntica a su correspondiente coordenada z de la circunferencia. Por tanto, su silueta o el ángulo sólido subtendido por la circunferencia del plato es circular y la geometría de la circunferencia se comparte aproximadamente en las tres dimensiones con la geometría del plano de su imagen, o su geometría proyectada. Cuando, en cambio, el plato se ve desde otro ángulo y su circunferencia es, por ejemplo, oblicua al plano del lente, la silueta y el ángulo sólido subtendidos son elípticos. Como la silueta del plato es producida por puntos que están a lo largo de ejes oblicuos a su plano, éstos son producidos por puntos del plato que tienen coordenadas z que no son idénticas. En consecuencia, la geometría elíptica de la imagen no es la misma que la geometría en las tres dimensiones de ninguna parte del plato. Es la misma geometría sólo en dos de ellas, y la tercera está codificada como en la percepción.

Que las imágenes compartan una geometría en dos dimensiones con lo que representan —y, si el objeto es tridimensional, representen la tercera dimensión generalmente como se representa en la retina— significa que, según esta descripción, las

imágenes son en parte naturales. Por tanto, para dar a entender sus significados no dependen enteramente de la convención o las normas culturales. Por el contrario, tienen una propiedad en común con lo que representan: la geometría del primer componente. Cuando el segundo componente se representa, en efecto, como en la retina, entonces este componente se muestra de un modo que, para un perceptor como nosotros, también es natural. Es en virtud de estos dos componentes como una imagen y el objeto representado, al ser vistos por un perceptor como nosotros, se experimentan como semejantes.

Las representaciones de objetos científicos que muestran geometrías, por lo general muestran las geometrías de objetos existentes. Cuando las representaciones son de clases que varían de un individuo a otro, tales como los dibujos morfológicos de especies de plantas, las geometrías no pueden ser de ningún individuo existente. Pueden ser más bien compuestos de distintos objetos o compuestos de un mismo objeto en diferentes etapas de su ciclo de vida o en distintas estaciones del año. Múltiples y diversos factores, pues, afectan a un mismo dibujo morfológico. Que múltiples y diversos factores afecten a un dibujo puede ser lo que se quiere decir con la afirmación de que las imágenes morfológicas se encuentran en una sección transversal entre un objeto y la prehistoria de la representación del objeto (Bredekamp, 2000). Si esta afirmación quisiera decir que para entender una ilustración hay que entender todos los distintos factores que llevaron a dibujarla, entonces sería una exageración. Tales representaciones, que muestran objetos complejos, no tienen que mostrarlos de manera compleja. Antes bien, tales dibujos representan especies mostrando las geometrías de individuos o partes de individuos. Por tanto, para entender los dibujos, además de tener que conocer algunas convenciones, por ejemplo, las asociadas con la representación de la variación estacional y de ciclo vital, el observador tiene que ser capaz, sobre todo, de reconocer geometrías. Para ello no tiene que saber lo que llevó a dibujar una ilustración; basta mirar para entender lo que las geometrías expresan sobre una especie.

Las representaciones en el arte a veces también son compuestos. Quizá la clase más simple sea la representación compuesta que lo es en virtud de la disposición de los objetos, como cuando se representan objetos o edificios comunes, como solía hacerse en el Renacimiento, de manera novedosa, más ordenada (Elkins, 1994, pp. 35, 126).

Una clase más compleja de compuesto en el arte es compuesto en virtud del modo en que representa las relaciones espaciales de las distintas partes de una escena. Cuando una representación muestra no sólo un objeto localizado, sino toda una escena, ésta puede mostrarse desde muchos puntos de vista distintos. En esta clase de compuesto no hay sólo un centro de proyección, sino muchos, cada uno ligeramente distinto de los demás (véase Tyler). La imagen aparece *como si* la viese alguien situado en múltiples lugares del mundo a la vez, uno por cada punto de vista, como, por ejemplo, en *El diluvio* de Uccello (Elkins, 1994, pp. 56, 131). Las perspectivas de múltiples puntos de vista difieren, pues, de las de un solo punto de vista en el modo como representan las relaciones espaciales entre las distintas partes de una escena. Las perspectivas de un solo punto de vista, introducidas en el siglo XV, fueron muy populares en esa centuria; el punto de vista usado era en muchos casos un punto inaccesible o, como puede verse en la obra de Alberti, un punto en la parte media del cuadro (Elkins, 1994, pp. 143, 145; véase, también, Tyler).

Los mapas a veces también son compuestos de múltiples perspectivas, como ocurre, por ejemplo, en los mapas de ciudades que representan los principales edificios civiles o históricos, cada uno desde el punto de vista que mejor ilustra el edificio, como un punto

situado justo enfrente de él. Las posiciones relativas de los edificios pueden representarse, pues, mostrando las proyecciones en perspectiva peculiares de los edificios en una proyección de una sola perspectiva de las calles de la ciudad. No hay, pues, sólo un punto de vista para todo el cuadro.

Los compuestos en el arte tratados hasta aquí son ficticios con respecto a las relaciones espaciales entre los distintos objetos representados o entre las distintas partes de una escena. Las figuras cubistas, como las de Picasso, que muestran figuras humanas *como si* se vieran desde múltiples perspectivas, son ficticias en otro aspecto. Muestran objetos *únicos* de una manera que incorpora las distintas siluetas que cada objeto tendría desde una diversidad de puntos de vista. El objeto representado resultante puede verse como un objeto que existe en un espacio extraño, ficticio o, alternativamente, como un objeto visto por una criatura ficticia, desde más de una perspectiva a la vez.

En los casos en que lo representado son objetos que nunca han existido, como seres humanos alados, no sólo los espacios, sino los objetos representados, son ficticios. Parecería que las imágenes que muestran espacios u objetos compuestos o totalmente ficticios plantean un problema para describir cuáles representan los objetos mostrando sus geometrías. Es decir, si no se representa ningún objeto o espacio existente, entonces es posible, de hecho, que tampoco se represente ninguna geometría, por lo que no hay geometría que pueda compartirse con su imagen.

Una manera de evitar esta dificultad es aceptar expresamente la intuición de que, cuando pensamos en objetos o espacios ficticios, nuestras ideas sobre ellos tienen un aspecto "como si se viera". Esto significa que las geometrías, o geometrías deseadas, de los objetos y espacios ficticios están implícitas en nuestras ideas sobre ellos. Esta noción reconocidamente imprecisa es, sin embargo, intuitiva. Si recurrimos a ella, podemos decir que nuestras ideas de objetos y espacios ficticios tienen geometrías deseadas y, en consecuencia, un objeto o espacio ficticio puede compartir su geometría deseada con una imagen de él.

Por último, suele presuponerse que las representaciones de objetos y espacios no sólo ficticios, sino comunes, dependen en gran medida de las normas culturales y, por tanto, éstos no pueden representarse efectivamente de una manera tan directa como la que he propuesto: compartiendo geometrías. Hay dos razones de este presupuesto. En primer lugar, las técnicas usadas para representar un objeto pueden variar mucho. Por ejemplo, como se propuso antes, la nitidez de una imagen puede ir desde el grano fino de una fotografía hasta las pinceladas visibles o los pequeños puntos de color. Además, la manera de representar la tercera dimensión también puede variar, por ejemplo, desde mostrarse como en una fotografía hasta tener la planitud exagerada de un vitral medieval o una estampa japonesa. Como tales diferencias de técnicas de representación son comunes, suele pasarse por alto el hecho de que un elemento significativo permanezca constante en medio de las diferencias.

La segunda razón por la que suele presuponerse que las imágenes no pueden representar efectivamente de una manera tan directa como la que he propuesto es que los objetos están impregnados de un contenido metafórico. Este capítulo no niega que una

consecuencia de este contenido metafórico es que los significados, incluidos los de las imágenes, difieren mucho de una cultura a otra (véase Kuhn, 1962). No obstante, el contenido metafórico de una imagen de una mujer alada, por ejemplo, depende de una técnica de representación más básica, esto es, la representación del objeto a través de una figura en el plano del papel, la cual se refiere al objeto compartiendo con él una geometría en dos dimensiones y representando su geometría en la tercera. Por tanto, si una mujer alada representa la victoria, o las grandes profundidades representan eternidades metafóricamente, estas interpretaciones metafóricas dependen de la capacidad de las imágenes para compartir geometrías con lo que representan.

Dalton originó su método para representar las relaciones espaciales interiores de las moléculas en una época en que el asunto era muy especulativo. El principio de que un átomo repele a otros de la misma clase y por tanto adopta una geometría o "estación" en la que está lo más lejos posible de los demás fue el fundamento para la asignación de geometrías hecha por Dalton. Fue sobre la base de este principio como representó, por ejemplo, los tres oxígenos de la molécula plana de trióxido de azufre en los tres vértices de un triángulo equilátero, como se muestra en la figura XV.1.

Cuando los químicos descubrieron más sobre las disposiciones en el espacio de los átomos de las moléculas, empezaron a necesitar maneras de mostrar estas geometrías en tres dimensiones. En respuesta a esta necesidad, se valieron de proyecciones en perspectiva. Van't Hoff, por ejemplo, desarrolló un sistema para representar la geometría de los centros de carbono mostrando proyecciones en perspectiva de tetraedros sólidos (véase Ramberg y Somsen, 2001; véase, también, Hudson, 1992). En estos diagramas, el centro de cada tetraedro representa la posición de un átomo central de carbono, y los vértices libres del tetraedro, las posiciones de los vecinos más cercanos del átomo. Si no se designa con una letra, cada átomo está representado, asombrosamente quizá, sólo por su posición en el centro o en el vértice de un tetraedro. En la figura *XV.3*, que presenta dos tetraedros unidos por uno de sus vértices, la geometría de los dos centros tetraédricos adyacentes de carbono del etano se muestra por sus posiciones implícitas en los centros de los tetraedros; las posiciones de los seis hidrógenos están representadas por los seis vértices libres de los tetraedros. Se emplean tetraedros también para mostrar la geometría de los centros trigonales de carbono, como en el etileno, dibujando dos tetraedros unidos por una de sus aristas; las posiciones de los dos carbonos trigonales están implícitas en los dos centros de los tetraedros, y los cuatro átomos adyacentes están representados por sus cuatro vértices libres. Los centros lineales de carbono, como en el acetileno, se muestran con dos tetraedros unidos por una de sus caras; una vez más, las posiciones de los carbonos lineales están implícitas en los centros de los tetraedros, y las posiciones de los dos átomos adyacentes están representadas por los dos vértices libres de los tetraedros.

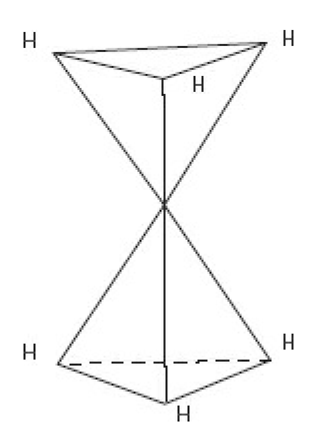


FIGURA XV.3. Símbolo de Van't Hoff del etano (hacia 1880).

Como regla general, las primitivas proyecciones en perspectiva, como las de Van't Hoff, se esquematizaron después, es decir, se sustituyeron con sistemas que hicieron convencional la representación espacial. Esto se debió en parte a la dificultad de dibujar proyecciones en perspectiva, y en parte a que en ellas algunos átomos tapan a otros. Otra razón es la simplicidad conceptual que podía lograrse con esa convención. La proyección de Fischer de una molécula, por ejemplo, representa las posiciones atómicas de su cadena principal en dirección vertical, y sus grupos laterales en dirección horizontal, dibujando líneas entre los vecinos más próximos para mostrar la conectividad. Entre las convenciones espaciales de este sistema se incluye que los vecinos más cercanos de un átomo de carbono, cuando se muestran a su derecha o izquierda, están colocados en el espacio ligeramente más cerca del observador que el carbono central, y los que se muestran en dirección vertical están colocados ligeramente más lejos. Esta convención permite dibujar los centros atómicos en columnas y filas sin tapar átomos ni enlaces. En este sistema, como se ilustra en la parte superior de la figura XV.4, las representaciones atómicas que no están cerca unas de otras en el papel pueden representar, no obstante, a los vecinos más próximos si éstos se encuentran conectados por una línea. En estos diagramas, pues, se renunció a la proyección en perspectiva a cambio de la facilidad de dibujo, así como de representaciones atómicas que no se tapan unas a otras. La figura XV.4 también indica la simplicidad conceptual que puede lograrse por el hecho de que la glucosa en forma de cadena recta parece casi idéntica a la forma cíclica, en la que puede convertirse muy fácilmente.

FIGURA XV.4. Representación de Fischer de la D-(+)-glucosa, y una proyección en perspectiva aproximada de la misma molécula.

Una consecuencia de la convencionalización de la representación de relaciones

espaciales es que las geometrías de los diagramas a veces ya no se comparten con dos dimensiones de la molécula, y el método de codificación de la tercera dimensión puede apartarse del modo en que se codifica en la percepción. Por tanto, a diferencia de las proyecciones en perspectiva, las representaciones convencionales requieren una explicación de las convenciones usadas para mostrar las relaciones espaciales.

Resumen

La representación de las relaciones espaciales entre átomos mostrando sus geometrías fue introducida de manera sistemática en la representación química por Dalton, cuando dibujó las relaciones espaciales entre los átomos de una molécula ilustrando las relaciones espaciales entre los círculos que los representaban. Los átomos de las moléculas que Dalton representó eran coplanarios, por lo que las posiciones de los círculos en el plano del papel mostraban las posiciones relativas de los átomos a los que representaban. En este sistema, los átomos y sus representaciones comparten una geometría en dos dimensiones. Cuando se generalizaron las especulaciones sobre las formas tridimensionales de las moléculas, se hizo necesario un método para mostrar la tercera dimensión. En la representación química se introdujeron sistemas en que los diagramas seguían compartiendo con los átomos una geometría en dos dimensiones, y que también representaban la tercera dimensión, como los diagramas de Van't Hoff de las geometrías de centros de carbono, que se valían de proyecciones de tetraedros sólidos.

Para mostrar todos los átomos de una molécula claramente y de manera que se pudieran dibujar con facilidad, se desarrollaron alternativas, como las proyecciones de Fischer, que hacían convencionales las relaciones espaciales. Como las relaciones espaciales son convencionales, interpretarlas en estos diagramas exige conocer las convenciones espaciales del sistema.

Este capítulo propone que el aspecto de representación que Dalton introdujo en la representación química —mostrar las relaciones espaciales entre los átomos compartiendo esas relaciones— dio carácter pictórico a sus diagramas moleculares. Este capítulo también propone que aquello que confiere carácter pictórico a una representación de un objeto tridimensional es que el objeto comparte su geometría en dos dimensiones con su imagen, y la tercera dimensión generalmente se representa como en la percepción. Según esta descripción, representar mostrando geometrías así es lo que hace a las imágenes en parte naturales. Es también lo que hace que una imagen y el objeto al que representa, cuando son vistos por un perceptor como nosotros, se experimenten como semejantes, y quizá sea lo que distingue a las imágenes de las representaciones que son lingüísticas o de otro modo convencionales.

AGRADECIMIENTOS

Gracias a Peter Ramberg, Eric Francoeur y Ursula Klein por muchas discusiones estimulantes sobre la representación molecular. Gracias a Harold Kincaid y George Graham por su estímulo y sus comentarios durante las últimas etapas de este trabajo. Gracias a Nancy Hall por su consejo y sus comentarios en todas las etapas de este trabajo. Gracias también a Ursula Klein y al Instituto Max Planck para la Historia de la Ciencia, de Berlín, por el apoyo económico durante las primeras etapas de este trabajo y a la Universidad de Alabama en Birmingham por el apoyo en las últimas etapas.

BIBLIOGRAFÍA

Bredekamp, H., *What's in a Line*?, conferencia dictada en el Instituto Max Planck para la Historia de la Ciencia, Berlín, 2000.

Earle, J. H., *Graphics for Engineers*, Addison Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts, 1989, pp. 390-395.

Eco, U., A *Theory of Semiotics*, Indiana University Press, Bloomington, Indiana, 1976, pp. 76-301.

Elkins, J., *The Poetics of Perspective*, Cornell University Press, Ithaca, Nueva York, 1994.

Goodman, N., *Languages of Art. An Approach to a Theory of Symbols*, Hackett Publishing Compay, Indianápolis, Indiana, 1976.

Hopkins, R., "Depiction", en E. Craig (ed.), *Routledge Encyclopedia of Philosophy*, Routledge, Nueva York, 1998(a), pp. 892-896.

———, *Picture, Image and Experience. A Philosophical Inquiry*, Cambridge University Press, Cambridge, 1998(b), pp. 77-93.

———, "What Makes Representational Painting Truly Visual?", *Aristotelian Society*, vol. supl. 77, núm. 1, 2003, pp. 151-167.

Hudson, J., *The History of Chemistry*, Chapman and Hall, Nueva York, 1992.

Klein, U., "Berzelian Formulas as Paper Tools in Early Nineteenth-Century Chemistry", *Foundations of Chemistry*, vol. 3, núm. 1, 2001, pp. 7-32.

———, T. Lenoir y H. U. Gumbrecht, *Experiments, Models, Paper Tools: Cultures of Organic Chemistry in the Nineteenth Century*, Stanford University Press, Stanford, California, 2003.

Kuhn, T., *The Structure of Scientific Revolutions*, University of Chicago Press, Chicago, 1962 [versión en español: *La estructura de las revoluciones científicas*, 3ª ed., FCE, México, 2006].

Lopes, D., *Understanding Pictures*, Clarendon Press, Nueva York, 1996.

Peacocke, C., "Depiction", *Philosophical Review*, vol. 96, núm. 3, 1987, pp. 383-910.

Peirce, C. S., "1931-1958", en C. Hartshorne y P. Weiss (eds.), *Collected Papers of Charles Sanders Peirce*, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1931-1958.

Ramberg, P. J., y G. J. Somsen, "The Young J. H. Van't Hoff: The Background to the Publication of his 1874 Pamphlet on the Tetrahedral Carbon Atom, Together with a New English Translation", *Annals of Science*, vol. 58, núm. 1, 2001, pp. 51-74.

Szabadváry, F., *History and Analytical Chemistry*, traducción de Svehla G. Oxford, Pergamon Press, Nueva York, 1966.

Tyler, C., http://www.ski.org/CWTyler_lab/CWTyler/Art%20Investigations/

Vollmer, S., "Two Kinds of Observation: Why Van Fraassen was Right to Make a Distinction, But Made the Wrong One", *Philosophy of Science*, vol. 67, núm. 3, 2000, pp. 355-365.

———, "The Philosophy of Chemistry Reformulating Itself: Nalini Bhushan and Stuart Rosenfeld's of Minds and Molecules: New Philosophical Perspectives on Chemistry", *Philosophy of Science*, vol. 70, núm. 2, 2003, pp. 383-390.

---

[*] Departamento de Filosofía, Universidad de Alabama en Birmingham, Birmingham, Alabama 35294-1260, EUA.

XVI. TÉCNICAS INSTRUMENTALES DE VISUALIZACIÓN EN LA QUÍMICA DE SUPERFICIES

DANIEL ROTHBART*

JOHN SCHREIFELS**

INTRODUCCIÓN

¿Qué es sustancia química? Según el eminente químico del siglo XX Friedrich Paneth, la "sustancia química" se define por los elementos químicos de la tabla periódica, y los elementos son causalmente responsables de ciertas clases de atributos empíricos (Paneth, 1962, p. 151). Con base en esta noción de sustancia, las técnicas instrumentales usadas por los químicos para analizar sustancias son casi transparentes, ofreciendo a los investigadores medios eficientes para detectar las verdaderas propiedades de los compuestos. Tales técnicas son presumiblemente separables, en principio, de la ontología de la sustancia química. Sin embargo, con base en el estado actual de la química analítica, el carácter de una sustancia química es inseparable de los supuestos metodológicos sobre la instrumentación. Los espectrómetros se usan para una manipulación hábil de material "preexistente" con base en diestras intervenciones en las propiedades dinámicas de una muestra. Los técnicos de laboratorio son agentes que comienzan un proceso, retiran obstáculos y liberan posibilidades naturales. Se realizan manipulaciones inducidas tecnológicamente, aparecen diversos efectos microscópicos y desaparecen enseguida, y se producen señales. Haces de fotones funcionan como sondas manipuladoras de la estructura atómica o subatómica de las muestras, como nos recuerda Ian Hacking (1983). Las muestras se hurgan, disecan y perturban mediante el uso de técnicas instrumentales.

En este capítulo postulamos que en el diseño de instrumentos usados en la investigación se evidencian ciertos compromisos ontológicos referentes al carácter de la sustancia química. Un claro precedente histórico a favor de este argumento puede encontrarse en la microscopía de Robert Hooke, cuyo perfeccionamiento en el siglo XVII del microscopio compuesto contribuyó profundamente a adelantos de la ciencia moderna. En la explicación de Hooke de sus nuevos aparatos ópticos se incluye un experimento mental que permitió a los investigadores visualizar el mecanismo causal que subyace a tales técnicas ("Diseño de Hooke del microscopio compuesto"). Para resaltar la centralidad de los experimentos mentales en la instrumentación moderna, examinamos los avances que antecedieron al diseño de los microscopios de efecto túnel ("Leer entre líneas"). Exploramos después la noción de muestra química ("El diseño de microscopios de efecto túnel"), a lo cual siguen los comentarios finales, sobre la centralidad de la tecnología instrumental en química ("¿Qué es una muestra?").

Para los filósofos naturales del siglo XVII, los aparatos experimentales estaban concebidos para extender los sentidos a regiones de otro modo inaccesibles y para aumentar la exactitud de las percepciones. Los telescopios amplificaban los poderes naturales del ojo, la trompetilla mejoraba la audición, y el barómetro y el termómetro simulaban los sentidos táctiles. A mediados de ese siglo los fabricantes de instrumentos sabían multiplicar los aumentos de un microscopio combinando lentes. En uno de los adelantos monumentales de la ciencia moderna, se reveló la óptica del microscopio compuesto. Muchos estudiosos atribuyen el descubrimiento a un fabricante de anteojos holandés llamado Jans Janssen, quien con su hijo Zacharias parece haber tropezado con la técnica por accidente, quizá por el acto fortuito de sobreponer dos lentes ante sus ojos (la autoría del descubrimiento todavía se discute [Bradbury, 1967, pp. 21-22]).

Antes de 1650, los telescopios se hacían con madera, latón, lentes y, a veces, adornos de marfil y cuero. Quizá el primer uso de lentes para visión telescópica fuera producto del trabajo de Janssen en 1608, y de inmediato recibió aplicación militar (Charleston y Angus-Butterworth, 1957, pp. 230-231). Al enterarse de este invento holandés, Galileo lo adaptó para estudiar los planetas y las estrellas, lo que condujo a un clima de gran exaltación ante el descubrimiento de los anillos de Saturno, los satélites de Júpiter, manchas en el Sol y montes en la Luna. También se sabe que Galileo convirtió el telescopio, con su lente cóncavo, en un microscopio (Brown, 1985). Con este nuevo instrumento Marcello Malpighi, uno de los microscopistas más originales de la época, realizó amplios estudios de los pulmones y la circulación humanos. Los nuevos instrumentos filosóficos remediaron las "flaquezas" de los sentidos.

Sin embargo, ¿cómo podían los nuevos instrumentos ópticos aumentar la capacidad de percepción sensorial dada por Dios? En su búsqueda de verdades sobre el mundo material, los filósofos naturales del siglo XVII acudían cada vez más a los talleres de mecánicos que fabricaban telescopios y microscopios. Entonces más que nunca, identificaban su rango profesional por los oficios relacionados con el manejo y la mejora de tales instrumentos, como metalistería, mecánica, carpintería, vidriería y tubería.

Robert Hooke fue el primer filósofo natural en registrar de manera sistemática descubrimientos experimentales con el uso de microscopios compuestos, suscitando un tremendo entusiasmo en toda Europa. Demostró gran talento en el arte de pulir lentes, lo que lo llevó al diseño de instrumentos para la investigación experimental. En su diario constan visitas casi diarias a talleres para perfeccionar los lentes (Price, 1957, p. 630). Descubrió una nueva clase de vidrio que utilizó para construir nuevos telescopios y microscopios. Con su mayor poder de aumento, estos nuevos telescopios desvelaron un mundo visible de cielos y estrellas, que entrañaba la posibilidad de descubrir seres vivos en la Luna o en otros planetas.

No obstante, la obra maestra de Hooke atañe a la microscopía. En uno de los grandes tratados de la literatura científica, *Micrographia: or some physiological descriptions of minute bodies made by magnifying glasses with observations and inquiries thereupon*

[Micrografía, o algunas descripciones fisiológicas de cuerpos diminutos hechas con lentes de aumento, con observaciones y preguntas al respecto] (1961), Hooke ofrece ilustraciones detalladas de hallazgos microscópicos. Muestra el filo de una navaja de afeitar, las puntas de una aguja y musgo que crece en cuero. Observó al microscopio insectos como piojos, mosquitos y moscas. De hecho, la *Micrographia* contiene un dibujo de 40 cm de un insecto (p. 210). La representación de Hooke de la superficie de un corcho muestra poros pequeños, o células, y es posible que en su descripción se encuentre el primer uso conocido del término "célula" en biología (p. 55). Tan impresionada quedó la Real Sociedad de Londres con sus demostraciones del poder de aumento del microscopio, que en 1663 le pidió que presentara por lo menos una observación en cada reunión (Bradbury, 1967, p. 39).

En su muy anunciado libro *Leviathan and the Air-Pump: Hobbes, Boyle, and the Experimental Life*, Shapin y Schaffer reducen la explicación de Hooke del microscopio compuesto a normas empiristas de conocimiento. Argumentan que, para Hooke, el poder de los nuevos instrumentos científicos reside en su capacidad para aumentar el dominio de los sentidos, revelando escenas espectaculares a quienes están capacitados en técnicas instrumentales. Según estos estudiosos, Hooke exhorta a los experimentadores a usar tales dispositivos para superar las "flaquezas" de los sentidos y extender el alcance de los atributos empíricos accesibles para ellos (Shapin y Schaffer, 1985, pp. 36-37).

El experimentalismo de Hooke, sin embargo, no es sometible a normas empiristas de conocimiento. En la interpretación de Shapin y Schaffer es notoria la falta de referencia a la explicación mecanicista de Hooke de las técnicas instrumentales, que presupone fuerzas mecánicas inobservables.

De la noción de Hooke de investigación experimental se desprenden varios temas. En primer lugar, Hooke concibe los instrumentos científicos como una extensión de mecanismos causales presentes en la naturaleza. Una de las ficciones generalizadas sobre la ciencia moderna es que los nuevos instrumentos ópticos del siglo XVII eran artefactos pasivos que ofrecían una ventana casi transparente a un paisaje empírico. Según esta concepción, los atributos inobservables debían permanecer inaccesibles para los experimentadores aun con el uso de instrumentos. Sin embargo, Hooke recomendó expresamente el uso de microscopios compuestos para revelar el funcionamiento de máquinas naturales que serían de otro modo indetectables (inobservables). Para él, el mundo natural es una serie de máquinas pequeñas incorporadas a otras mayores. Los movimientos de las máquinas a un nivel son producidos por máquinas a un nivel más profundo, constituyendo las ruedas, motores y resortes del microcosmos. Cada cuerpo material está dotado de poderes que son causalmente responsables de efectos detectables. Todo instrumento es agente de cambio, esto es, una fuente de movimiento que produce ciertos sucesos. El poder de un microscopio compuesto para revelar verdades reside en el aprovechamiento que hace su diseñador de los mecanismos causales de la naturaleza.[1] La confiabilidad de cualquier microscopio, en particular, radica en los procesos causales que son responsables de las imágenes que aparecen en el ocular. El uso hábil de un microscopio compuesto puede ayudar a responder las

siguientes preguntas analíticas: ¿cuáles son los agentes causales responsables de que algunos fluidos se unan fácilmente con otros o se disuelvan en ellos? ¿Cómo podemos explicar la fermentación por levaduras? ¿Cómo puede la infección de un hombre llevar a la destrucción de millares más? El descubrimiento de los mecanismos causales de la naturaleza debe estar incluido en la misión de los experimentadores, aunque tales mecanismos estén "ocultos y muy lejos de la percepción de los sentidos" (Hooke, 1961, p. 47).

En segundo lugar, las conjeturas sobre cualquier cuerpo natural son derivables de asociaciones analógicas con el funcionamiento de cuerpos artificiales. Los filósofos naturales deberían acudir a los mecánicos en busca de penetración intelectual en el funcionamiento del universo. Aunque la mecánica es una empresa práctica, en parte física y en parte matemática, Hooke halló inspiración filosófica sobre las verdades de la naturaleza en los descubrimientos de los mecánicos. Creía que incluso las enfermedades humanas podían diagnosticarse descubriendo "qué instrumento o máquina está descompuesto" (1961, p. 39). Los filósofos naturales deberían familiarizarse con las técnicas de los mecánicos de batir, prensar, moler, pulir, cortar, aserrar, limar, impregnar, disolver, calentar, quemar, congelar y fundir (1961, p. 60). Desde luego, estas técnicas dependen de una manipulación hábil de los cuerpos materiales, y por lo general requieren la conexión física de los cuerpos mediante la construcción de ensambladuras y ganchos. La imagen de un reloj ofrece una comprensión especial del funcionamiento de la naturaleza, con el volante que bate, ruedas que giran y macillos que percuten. Por analogía, "es posible descubrir los movimientos de las partes internas de los cuerpos, sean animales, vegetales o minerales, por el sonido que hacen" (Hooke, 1961, p. 39).

En tercer lugar, para Hooke cualquier máquina del mundo natural se caracteriza por su capacidad activa para producir movimiento y su propiedad reactiva de ser movida por otros cuerpos. Cualquier máquina es cognoscible por su poder de manipular, agitar o transformar otra máquina, y por su propensión a ser alterada a su vez. Tales aparatos presentan el poder de unirse con otros cuerpos o repelerlos, como se evidencia en la capacidad de cualquier fluido para unirse con otros fluidos o repelerlos (Hooke, 1961, p. 46). Hooke explica el éxito del microscopio por los mecanismos causales que son responsables de los acontecimientos observables. Cualquier mecanismo causal es un sistema de entidades con capacidad para generar movimiento en otros cuerpos o ser movido por ellos. Las condiciones de la agitación son hechos causales, y los sucesos resultantes son efectos.

En cuarto lugar, para aprehender el funcionamiento de una máquina los experimentadores deben adquirir la aptitud de visualización de un diseñador. Para una filosofía experimental propia, escribe Hooke, "el intelecto, cual hábil arquitecto, debe entender lo que se propone hacer [...]" (Waller, 1705, p. 18). Los diseñadores del siglo XVII recurren a las habilidades de artistas a fin de registrar el método y la historia de determinada investigación científica. Los diseñadores están preparados para visualizar cómo se llevará a cabo la investigación. El lenguaje del diseño gráfico es fundamental para tales habilidades. Por medio de ilustraciones esquemáticas los diseñadores ofrecen

una viveza de representación que invita a una participación indirecta. A través de visualizaciones es posible distinguir los fugaces acontecimientos del laboratorio de los "elementos" duraderos que permanecen estables bajo la interferencia tecnológica.

Con una perspectiva de cuatro siglos, la *Micrographia* se yergue hoy, defendiblemente, como una de las grandes obras sobre la filosofía de la investigación experimental. En minuciosas descripciones de sus experimentos, Hooke guía a los experimentadores en el uso hábil de los instrumentos. De su orientación mecanicista surge una sólida noción de la investigación experimental. Cada experimento es por sí solo una especie de sistema mecanicista que aprovecha el poder del instrumento, las capacidades de la muestra y las habilidades del experimentador en la operación de máquinas, tanto artificiales como naturales. Desde luego, los instrumentos ópticos intensifican las capacidades sensoriales. Sin embargo, tal intensificación se explica por las técnicas de las artes mecánicas, revelando el poder de las "máquinas de la naturaleza" en las regiones más profundas. Detrás de la óptica de la visión están las manipulaciones del mecánico de los cuerpos materiales. El prototipo fundamental de investigación experimental se centra en la mano y el ojo de un mecánico en la manipulación hábil de las máquinas, antes que en los órganos sensoriales de un observador en la percepción pura de atributos empíricos.

Como se ha mostrado, pueden extraerse varios temas de las contribuciones de Hooke a la microscopía. Primero, Hooke recomendaba expresamente el uso de microscopios compuestos como herramientas dinámicas para revelar el funcionamiento de máquinas de otro modo inobservables. Segundo, pueden derivarse suposiciones sobre cualquier cuerpo natural de asociaciones analógicas con el funcionamiento de las máquinas artificiales. Tercero, cualquier máquina del mundo natural se caracteriza por sus capacidades para producir movimiento y por sus propiedades reactivas. Cuarto, para aprehender las capacidades de una máquina, los experimentadores deben adquirir las habilidades de visualización de un diseñador.

La vigencia de las ideas de Hooke en la investigación contemporánea se evidencia en su obra sobre diseño instrumental. Así como Hooke insistía en el uso de técnicas visuales para mostrar las operaciones de una máquina, hoy se espera que los diseñadores construyan modelos visuales de un dispositivo o proceso. En sus representaciones gráficas de máquinas los ingenieros con frecuencia recurren a un lenguaje de líneas, formas e imágenes. Suelen usarse ilustraciones esquemáticas para representar un modelo visual de la operación de una máquina, mostrando cómo funcionará un dispositivo en condiciones idealizadas (el ojo de la mente requiere una síntesis de experiencias pasadas y una previsión de artefactos futuros [Ferguson, 1992, p. 42]). En sus planos de diseño de instrumentos, los investigadores visualizan las relaciones funcionales entre los componentes de una máquina. Estos planos ofrecen una visualización idealizada de operación expresada por medios gráficos. Tales medios son idóneos para convertir una imagen mental en información. Desde luego, las visualizaciones son ubicuas en las ciencias teóricas. Durante siglos los investigadores se han valido de modelos conceptuales para visualizar procesos del mundo real. A través de la modelización los científicos pueden reproducir procesos del mundo en un ámbito abstracto de ideas.[2] Las categorías de verdad y falsedad no tienen cabida en la definición del éxito o fracaso de un modelo teórico.

La visualización de una técnica propuesta es un recurso retórico común de persuasión. Con frecuencia el plan de un diseñador se somete al escrutinio de compañeros investigadores y posibles clientes y críticos. Los diseñadores de instrumentos tienen a su cargo la tarea de explicar su trabajo a fabricantes, justificar su investigación a entidades financiadoras o convencer a experimentadores reacios de seguir nuevas técnicas. A menudo leemos que los experimentos mentales están confinados al ámbito de la física (Brown, 1991, p. 31). Sin embargo, el diseño de un instrumento puede probarse mediante experimentos mentales sin el uso de metales, cables ni equipo de laboratorio. Tales experimentos se producen en un espacio de diseño conceptual donde se conciben ciertos procesos y se anticipan sus efectos. Un espacio de diseño es un espacio abstracto de representación que se usa para reproducir el movimiento, donde se imaginan ciertos elementos conceptuales y se anticipan los efectos. Antes que ofrecer un medio para copias visuales de máquinas reales, un espacio de diseño define una gama de movimientos posibles de “objetos”, con arreglo a principios de la ingeniería y las ciencias físicas. En tales espacios trabajan arquitectos, artistas y mapeadores.

Por medio de estos planos de instrumentos, los diseñadores invitan a los lectores a participar indirectamente en experimentos hipotéticos. Los lectores de informes de diseño suelen convertirse en testigos virtuales al participar en la evaluación crítica de los diseños. El lector enumera, al menos para sus adentros, las averías de equipo, errores de implementación y efectos de interferencia que plagaron experimentos anteriores. ¿Son pertinentes esos peligros al experimento actual? Si es así, ¿se pueden evitar? Las respuestas a estas preguntas requieren un dominio del tema que suele estar limitado a

testigos expertos. Un lector participa indirectamente en un experimento con el fin de evaluar el plan de acción inicial. Un lector de ilustraciones esquemáticas prevé cómo funcionaría el aparato en condiciones experimentales. Se produce así un experimento mental, invitando a la crítica del diseño experimental. Como herramientas de persuasión, los planos de diseño proporcionan a los lectores una visión cognitiva de los sucesos de laboratorio de maneras que inducen a la aprobación. Con frecuencia se convence a los lectores de que *podrían* reproducir los mismos procesos y obtendrían la misma correspondencia entre conceptos y percepciones (Gooding, 1990, p. 167). Aunque el lector nunca realice el experimento descrito en el informe, por lo general recuerda una participación directa en experimentos semejantes a los descritos. Se espera que el lector siga una narración que selecciona e idealiza ciertos pasos de un procedimiento (p. 205). Esta narración transporta al lector de lo real a lo posible reproduciendo indirectamente los aspectos significativos del experimento, centrándose en el diseño, equipo material y fenómenos microscópicos del instrumento.

Los planos de diseño suelen expresarse mediante la disposición de formas. Para leer la información visual sobre instrumentos contenida en tales dibujos, un observador versado debe entender el lenguaje de símbolos gráficos. El vocabulario del diseño se define por una gramática de puntos, líneas y formas. Con esta gramática los diseñadores de instrumentos ofrecen un lenguaje para representar una técnica experimental. Esta representación suele lograrse con una serie jerarquizada de dibujos de profundidad creciente. Conforme el lector despliega las capas de dibujos, se va revelando una información cada vez más detallada. Ciertos símbolos gráficos sirven como expresiones interrogativas sobre un proceso e invitan a una inspección mayor y más profunda. En un plano de diseño, las líneas de una ilustración esquemática reciben especificidad de otros dibujos que representan procesos más profundos. El modelo visual de un instrumento induce a una participación indirecta en la detección de una transición de hechos microscópicos a macroscópicos. Tal secuencia reproduce el carácter legítimo de la integración (Rothbart, 2003).

Un ingeniero emplea líneas para representar aspectos de los movimientos posibles de la maquinaria. A un observador lego las ilustraciones esquemáticas le parecen estáticas, representaciones como de naturaleza muerta de un armatoste. En cambio, los observadores expertos pueden aprehender el movimiento de tales diagramas. Un observador atento prevé cómo cambiarían nuestras percepciones del movimiento posible de los objetos. Cuando se representan en dos dimensiones, las líneas del plano de diseño de un ingeniero se extienden entre superficies expuestas y ocultas, desde la perspectiva del lector.

Para explicar cómo funciona una máquina, los diseñadores se refieren a mecanismos causales subyacentes. En este contexto, un mecanismo está constituido por un sistema de entidades que es agente de cambio, causalmente responsable de producir efectos detectables. Consideremos los mecanismos causales que subyacen a las técnicas instrumentales de la química de superficie.

Las propiedades de las superficies han causado fascinación y frustración a los investigadores. A través de importantes adelantos del instrumental químico se ha hecho realidad el viejo sueño de observar una estructura de átomos en la superficie de un compuesto. Provistos de estos nuevos poderes de detección, los investigadores han producido resultados asombrosos relacionados con la superficie del silicio, por ejemplo, las espirales distintivas del ADN o el proceso bioquímico asociado con los coágulos de sangre. A tales adelantos pueden atribuirse directamente unas tres mil publicaciones al año.

Gerd Binnig y Heinrich Röhrer, descubridores de la microscopía de efecto túnel, invocaron la famosa maldición de Wolfgang Pauli: "¡La superficie es un invento del diablo!" (Binnig y Röhrer, 1985, p. 50). En esta sección destacamos tres grandes adelantos de las técnicas instrumentales de la química de superficie: la microscopía electrónica (MEB), la microscopía de iones en campo (MIC) y la microscopía de efecto túnel (MET). Mostramos, en particular, cómo los planos de diseño de microscopios de efecto túnel actúan como experimentos mentales mecanicistas. Un experimento mental mecanicista se vale de una explicación conceptual del funcionamiento de un instrumento en relación con los mecanismos subyacentes de cambio. En el mecanismo que subyace a esta técnica se incluye una microsonda, en forma de aguja afilada, que recorre una superficie preparada. Esta sonda, o aguja, barre la superficie de la muestra moviéndose hacia arriba y hacia abajo, a izquierda y derecha, adelante y atrás, a intervalos de un solo angstrom, para revelar sus propiedades.

Conocida por los investigadores en química, ciencia de los materiales, geología y biología, la MEB proporciona información detallada sobre superficies de sólidos a escala submicrométrica. La técnica procede así: después de bombardear los átomos de la superficie de un metal con electrones de alta energía, se mide la distribución espacial de los electrones. Para obtener una imagen, la superficie de una muestra sólida se barre describiendo una cuadrícula. Una cuadrícula es una pauta en la cual un haz de electrones *1*) barre una superficie en línea recta, *2*) regresa a su posición inicial y *3*) vira hacia abajo un intervalo estandarizado (Skoog y Leary, 1992, p. 394).

Esta técnica resolvió un importante problema asociado con la resolución de la imagen. Al realizar un análisis con microsonda electrónica, la resolución espacial de la imagen está limitada por el hecho de que las partículas de sondeo deben ser más pequeñas que la estructura atómica sometida a observación. Imaginemos, como analogía, tratar de percibir arañazos en una superficie lisa pasando un dedo por ella. Los arañazos que fueran mucho más pequeños que el ancho de la uña pasarían inadvertidos, mientras que los mayores se sentirían fácilmente. En la MEB el problema de la resolución espacial surge del hecho de que una longitud de onda característica de la luz visible mide 600 nm de ancho, mientras que el diámetro aproximado de un átomo es de 0.2 nm. Como la longitud de onda de la luz visible es, pues, varios miles de veces mayor que el diámetro de un átomo, la colocación de cada uno de éstos es inobservable. Para resolver este problema, los diseñadores desarrollaron una técnica en que la longitud de onda de los electrones de sondeo es menor que el tamaño atómico de 0.2 nm (Bonnel, 1993, p. 436).

A pesar de este gran avance, rápidamente los diseñadores identificaron tres deficiencias importantes de la MEB: primero, las imágenes de una superficie pueden formarse sólo en un vacío, que es difícil de producir; segundo, es posible que las imágenes observadas no reproduzcan fielmente la estructura superficial original; tercero, los electrones de alta energía cinética penetran la superficie relativamente muy adentro y luego son reflejados al detector. Este proceso de penetración y reflexión distorsiona la imagen de la primera o las dos primeras capas atómicas. A causa de tal distorsión, el mejor resultado que pueden esperar los investigadores es un promedio de muchas capas atómicas. Para superar estas deficiencias los científicos exploraron métodos alternativos de detección de propiedades de superficies atómicas.

Microscopía de iones en campo

En 1936 Erwin Müller desarrolló la primera técnica para detectar propiedades de átomos individuales en superficies metálicas (Chen, 1993, p. 412) (véase una historia de este invento en Drechsler, 1978). Este instrumento, llamado microscopio de iones en campo, tiene un diseño simple constituido por un sistema de vacío, una punta de aguja y una pantalla fosforescente. Los diagramas y el informe de Müller permiten a los lectores visualizar la técnica que desarrolló (Müller y Tsong, 1969, p. 99) (figura XVI.1).

Durante un experimento, se aplica alta tensión al espacio situado entre el filamento y la pantalla. Luego de colocar la punta de aguja en una muestra, se logra que los átomos sometidos a investigación adsorban directamente átomos de helio o neón. Se aplica entonces a la superficie un potencial del orden de 10 000 voltios, lo que hace que los átomos de helio o neón sean liberados en forma de iones y dirigidos a la pantalla fluorescente. En su camino a la pantalla, los iones adyacentes se alejan unos de otros, amplificando la distribución de los átomos en la superficie. Este proceso se muestra en la figura XVI.2 (Müller y Tsong, 1969).

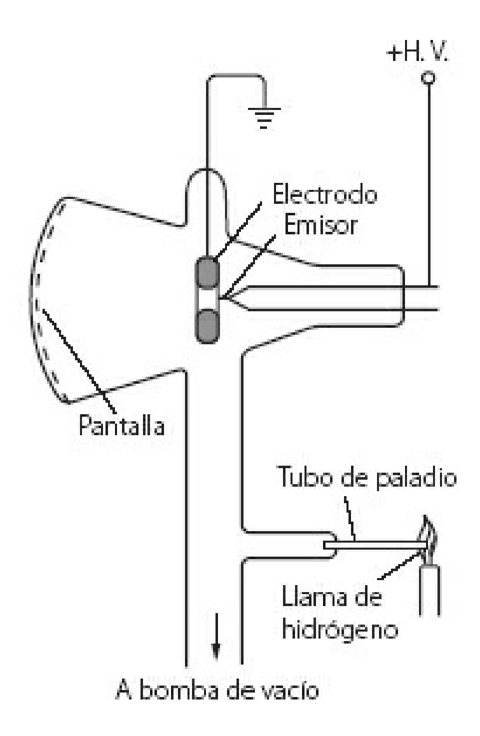


FIGURA XVI.1. *Diagrama original del microscopio de iones en campo.*

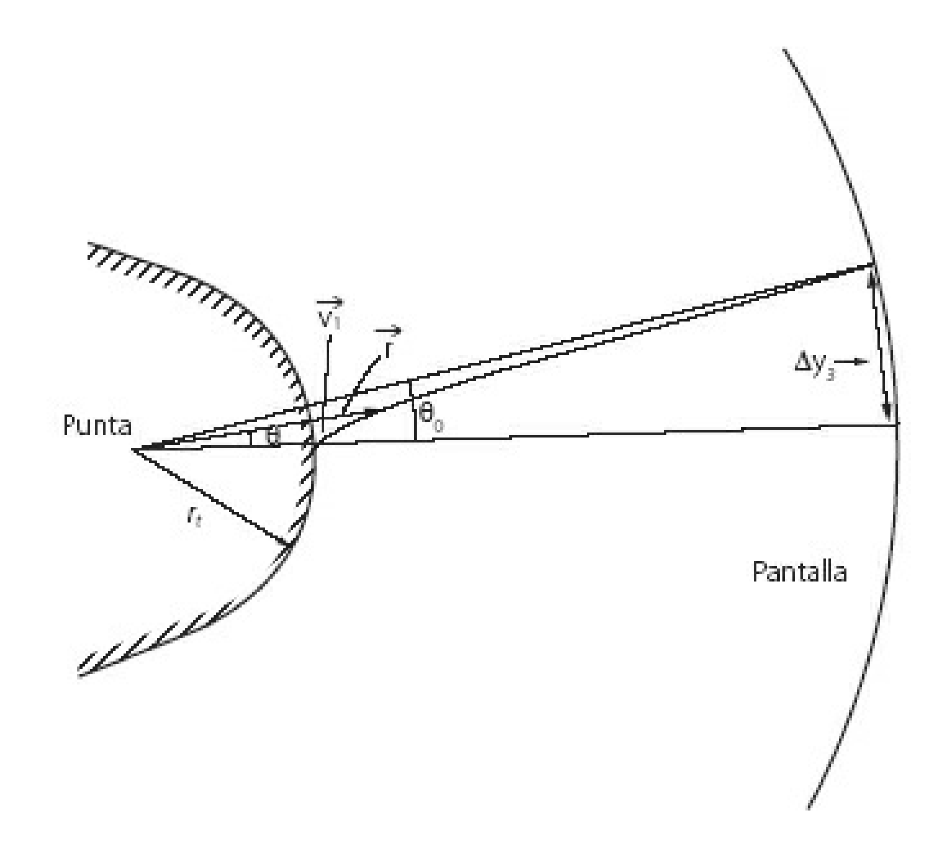


FIGURA XVI.2. *Representación del camino que sigue un ión de la punta a la pantalla.*

Se muestra que los átomos se alejan aún más entre sí después de incidir en la pantalla que cuando yacen inertes en una superficie. Cuando los átomos de helio o neón golpean la pantalla y producen una imagen en la estructura de la superficie, retienen sus posiciones relativas originales.

Para convencer a la comunidad científica, los diseñadores del MIC construyeron un modelo físico de punta de tungsteno basado en analogías con una semiesfera, como se muestra en la figura XVI.3 (Müller y Tsong, 1969, p. 78).

Luego de pintar los relieves (bordes prominentes de planos individuales) con un recubrimiento fosforescente en el modelo, se observó que el dibujo formado por bolas luminosas y oscuras se asemejaba a imágenes obtenidas con MIC, como se muestra en el diagrama de la derecha de la figura XVI.3. El modelo físico reproduce el dibujo que se obtiene cuando se liberan átomos de xenón de los relieves. Aunque este modelo ayudó a explicar las observaciones de tales imágenes, su construcción era impráctica debido al gran número de átomos (bolas) que se necesitaban.

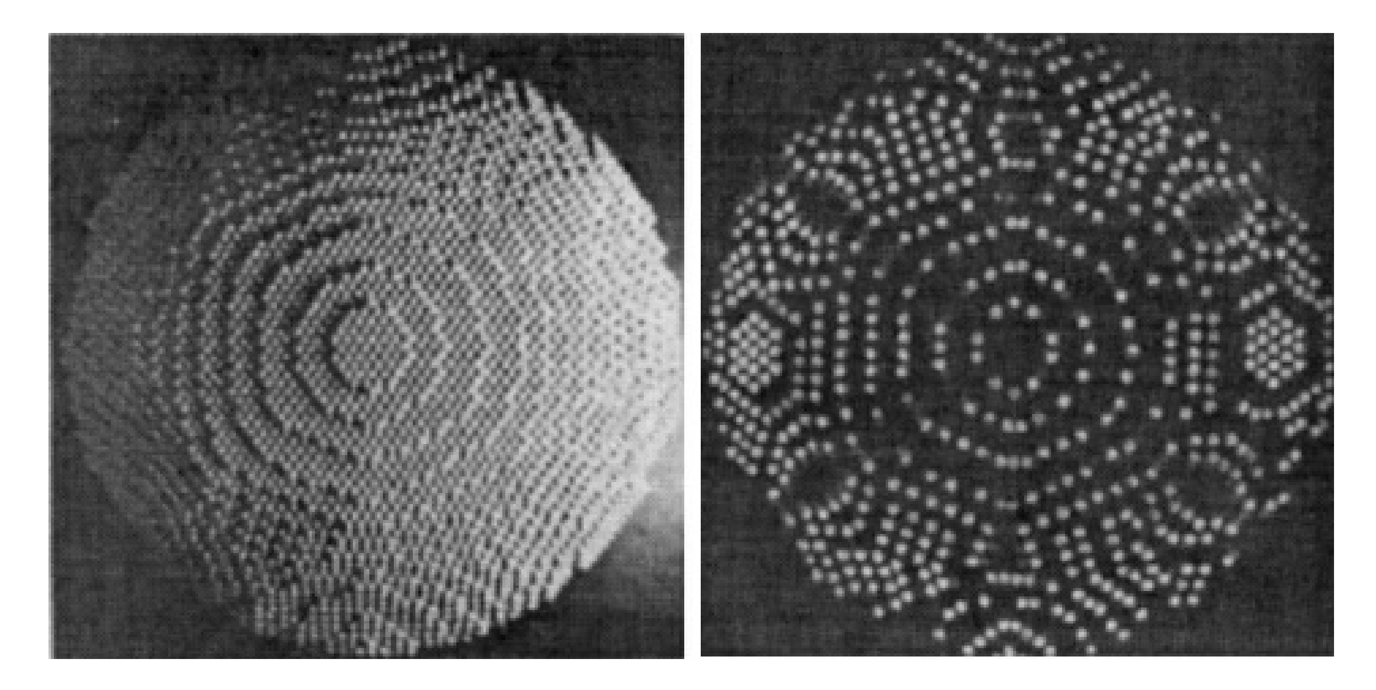


FIGURA XVI.3. *Izquierda: modelo de bolas de una superficie ordenada. Derecha: modelo de bolas con los átomos en relieve recubiertos de pintura fosforescente y vistos en la oscuridad.*

Como ocurrió con la MEB, los experimentadores no tardaron en identificar deficiencias de la MIC. Al igual que la microscopía electrónica, la MIC requiere que las imágenes de una superficie se produzcan en un vacío. Además, el área de la imagen está limitada a unos 0.8 nm^2. Por otra parte, se necesitan bajas temperaturas para manejar el microscopio; la mayoría de las superficies no adsorben el neón ni el helio salvo a temperaturas de licuefacción del nitrógeno o del hidrógeno.

Binnig y Röhrer, trabajando ambos en la IBM en Zurich, descubrieron un medio para realizar mediciones de alta resolución que ofrecía las siguientes mejoras con respecto a la técnica topográfica que lo antecedió: *1*) se redujo la distancia entre la punta del emisor y la muestra, *2*) se redujo la tensión necesaria entre ambas, *3*) se afiló la punta del emisor y *4*) se añadió amortiguación de vibraciones (Binnig *et al.*, 1982, pp. 178-180). Por su descubrimiento, ganaron el Premio Nobel de Química de 1986.

En la MET, como en las otras técnicas descritas, una aguja barre una superficie preparada. Al hacerse pasar una corriente de la aguja a la superficie del material que se está examinando, se puede "sentir" la topografía de ésta. Mediante una técnica de efecto túnel, los electrones de sondeo de la MET escapan de la interacción con los átomos de la superficie viajando por una ruta distinta de la que seguirían "normalmente", evitando así interferencias experimentales.

En condiciones normales se necesita una cantidad relativamente grande de energía (algunos eV) para extraer un electrón de un átomo. Normalmente un electrón debe adquirir cierta cantidad de energía para librarse de la influencia de un átomo de la superficie. Como se muestra en la figura XVI.4, se requiere un mínimo de energía para que el electrón sobrepase esta barrera de energía.

La barrera de energía es igual a la diferencia de energía entre la carga de un electrón unido al átomo de la superficie y la carga de un electrón liberado de la influencia de un átomo de la superficie. Si se sobrepasa una barrera de energía, entonces la cantidad de energía que lo ha hecho se une a un átomo de la punta. No obstante, esto rara vez ocurre porque en condiciones de laboratorio es impráctico producir la cantidad de energía necesaria para superar la barrera de energía.

Sin embargo, los procesos mecanocuánticos permiten que un electrón viaje de un átomo (de la punta del emisor) a otro (de la superficie) por una ruta de baja energía. Esta ruta es posible gracias a una pequeña superposición de las funciones de onda de cada electrón (Atkins, 1978, p. 402). Desde el punto de vista energético, el electrón viaja a un átomo de la superficie abriendo un túnel *a través* de la barrera de energía, *no pasando por encima* de ella. El efecto túnel se produce cuando los electrones se liberan de la barrera de potencial sin la energía térmica que normalmente se requiere. En su patente de 1982, tramitada ante la Oficina de Patentes de los Estados Unidos, Binnig y Röhrer muestran cómo puede producirse el efecto túnel entre dos metales (Binnig y Röhrer, 1982, hoja 1).

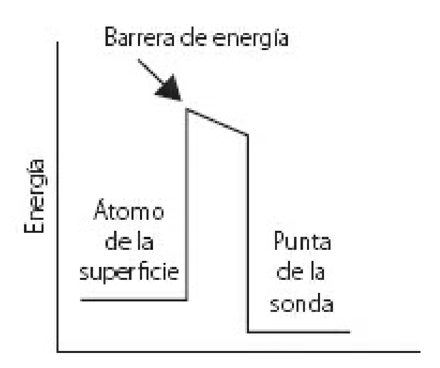


FIGURA XVI.4. *Barrera de energía cuando un electrón viaja de un átomo de la superficie a la punta de la sonda de un MET.*

En la figura XVI.5, los electrones del primer metal quedan atrapados en un primer pozo de potencial que se indica con el número 14. El segundo metal se caracteriza por un segundo pozo de potencial (15), que está separado del primero por una barrera de potencial (16). Para que se produzca el efecto túnel, los electrones deben desprenderse del primer metal y entrar en un vacío donde su energía *(E)* se eleva al límite superior de los estados de energía limitados, llamado borde de emisión (17) (Binnig y Röhrer, 1982, hoja 6). Binnig y Röhrer tratan la dinámica del efecto túnel en el siguiente pasaje:

> En un sistema atómico o en un cuerpo sólido, si las partículas con carga se someten a una interacción constituida por un componente repulsivo de largo alcance y un componente atractivo de corto alcance, entonces la fuerza resultante alcanza una pared de potencial o barrera. Según las concepciones clásicas, sólo las partículas provistas de mayor energía que la barrera pueden atravesarla. No obstante, junto a una barrera de potencial siempre hay un número finito de partículas capaces de atravesarla aunque no tengan suficiente energía. En cierto modo, la cruzan por debajo a través de un túnel. Este efecto túnel, como se ha llamado, sólo se puede explicar por la mecánica cuántica […] Según el efecto túnel existe una probabilidad calculable de que un número finito de electrones limitados por un potencial puedan cruzar la barrera del túnel aun con pocas diferencias de tensión […] Algunos electrones atrapados son capaces de formar una corriente de túnel que atraviesa la barrera [Binnig y Röhrer, 1982, hojas 1-2].

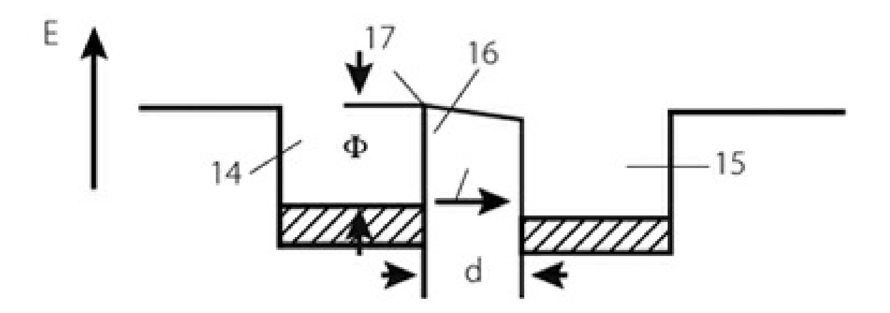


FIGURA XVI.5. *Efecto túnel de electrones entre dos metales.*

La probabilidad del efecto túnel depende del espesor de la barrera, y el efecto se produce sólo cuando la distancia entre los átomos de la superficie y los de la punta es pequeña y cuando se aplica una tensión baja entre ellos. La corriente de túnel disminuye

exponencialmente en cuatro órdenes de magnitud en relación con la distancia entre la superficie y la punta (brecha) (Binnig *et al*., 1982, pp. 178-180). Estos resultados indican que la brecha debe encontrarse en el orden de unas cuantas décimas de nanómetro, ya que, si es mayor, la corriente de túnel resulta muy pequeña. A mayores distancias la corriente de túnel se obtiene produciendo un potencial mucho mayor, en el rango de algunos miles de voltios. Se desprenden electrones de la superficie de la punta y fluyen a la muestra (Chen, 1993, p. 412).

Con base en planos de diseño de microscopios de efecto túnel, éste puede analogarse con un proceso de perforación a través de una barrera material de bordes oclusivos. Una barrera natural se analoga con un impedimento físico para que los electrones escapen de la influencia de un átomo de la superficie. Se dice que los electrones "cruzan por debajo" la barrera de potencial "a través de un túnel". La barrera de energía tiene una superficie que se extiende entre un volumen expuesto y uno oculto. El experimento mental del efecto túnel reproduce un proceso de movimiento a través de una superficie que ocluye. Los experimentadores pueden visualizar los electrones moviéndose a través de una barrera de energía, y no por encima de ella, como analogía gráfica de una experiencia de taladrar una pared maciza.

La figura XVI.6 es un diagrama esquemático de un microscopio de efecto túnel.

Tres partes de cerámica piezoeléctrica componen el piezoescáner (Magonov y Whangbo, 1996, p. 323). La tensión aplicada a cada una desde el control electrónico determina la posición exacta de las direcciones *x, y* y *z*. Con un sistema especial de circuitos se mide la corriente entre la punta y la muestra, y se emplean computadoras para procesar las señales enviadas al control electrónico, así como la señal recogida de la corriente de túnel.

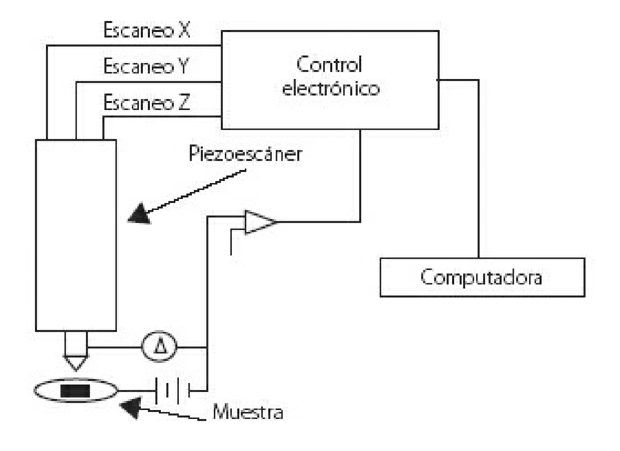


FIGURA XVI.6. *Diagrama esquemático de los principales componentes de un* MET.

En términos prácticos, un experimento topográfico se inicia colocando la punta en la posición adecuada con respecto a una muestra. Se mueve luego la punta en la dirección *z* para ajustar la distancia entre ella y la muestra, distancia que no debe ser superior a unas cuantas décimas de nanómetro. Entonces se aplica una pequeña tensión de polarización entre la muestra y la punta. Mientras la punta se acerca a la superficie, una corriente de

túnel guía la posición definitiva en la dirección z. Después se incrementa la tensión de escaneo X, haciendo que la punta se mueva en la dirección x pero no en la y.

También las propiedades detectables de una muestra deben ser susceptibles de estudio por las clases de técnicas instrumentales que se emplean en la investigación. Los instrumentos analíticos no operan directamente sobre objetos ocultos, sino que implican a los experimentadores en diversas manipulaciones de una sustancia preparada. Desde antes de que puedan lograrse tales manipulaciones, los químicos analíticos deben determinar si una muestra contiene impurezas. Si es así, los químicos intentan retirar las sustancias que interferirían las señales de la sustancia analizada (pura). La purificación comprende un conjunto de técnicas de laboratorio que dejan la muestra externamente preparada para la investigación instrumental. El empleo de estas técnicas preparatorias relativamente ordinarias puede enmascarar compromisos más profundos con categorías fundamentales de la naturaleza y, al hacerlo, imponer restricciones considerables al carácter de la sustancia. Las técnicas de purificación presuponen creencias fundamentales sobre la naturaleza de las propiedades y el modo de la investigación.

En química analítica una muestra se depura de elementos extraños por métodos de "esterilización". Por ejemplo, se la puede someter a altas temperaturas, disolver con ácidos minerales calientes o convertir en solución acuosa. En algunos experimentos una muestra pura es aquella cuya temperatura permanece constante durante ulteriores transiciones de fase. Una muestra material se considera pura si presenta propiedades que persisten en el curso de intervenciones tecnológicas. Retirar impurezas de una muestra presupone un compromiso positivo con ciertas técnicas experimentales. Al preparar una muestra para análisis instrumental, un experimentador aísla y "exhibe" ciertos atributos del compuesto. En espectroscopia contemporánea, se puede saber si una muestra es pura por su invariancia durante las técnicas de purificación, comúnmente asociadas con variaciones de las condiciones termodinámicas. En química analítica una muestra se diseca, se manipula físicamente y se calienta, enfría, separa o sintetiza. La invariancia de una muestra a través de las intervenciones permite a los experimentadores aislar después las especies químicas como productos de reacciones. El producto de tales procedimientos puede, a su vez, funcionar como componente para ulteriores investigaciones químicas en nuevas condiciones controladas (Schummer, 1998).

El experimentador constantemente compara resultados de laboratorio con una "imagen" idealizada de las "verdaderas" propiedades del sistema. Ciertos elementos del paisaje experimental se buscan, otros se evitan y otros más se ignoran. Las semejanzas conocidas se resaltan, las desemejanzas se suprimen y las relaciones desconocidas se exploran. En la investigación de laboratorio, una muestra nunca es un producto terminado, nunca se libera de las restricciones asociadas con la detección. A grandes rasgos, las categorías ontológicas que caracterizan una muestra se evidencian en las ideas asociadas con un nuevo ser. La noción de pureza se basa en el supuesto de que algunas sustancias son homogéneas con respecto a propiedades reproducibles.

Para los químicos, las sustancias homogéneas son elementos invariables de los cuales se componen otras sustancias más complejas o compuestas (Brock, 1992, pp. 174-175).

Una muestra se conoce por su capacidad para producir, crear y generar sucesos detectables mientras está sometida a varias interferencias. Definida de este modo, la noción de muestra pura no se refiere a ciertas propiedades aisladas, de existencia independiente. Una muestra pura así considerada no es pasiva; es reactiva. La pureza se revela en las reacciones a las intervenciones. La muestra purificada está definida por capacidades que *permiten* la intromisión de fuerzas externas y que *reaccionan* a tal intromisión de maneras que generan efectos detectables. La noción de sistema reactivo se convierte en prototipo de las propiedades de una muestra. Los cambios químicos y físicos que se producen se basan en las condiciones asociadas con un sistema reactivo, tales como la fase en la cual ocurre la reacción, la naturaleza del solvente, la temperatura y la incidencia de radiación (Suckling *et al.*, 1978, pp. 65-68).

En este contexto, la conocida metáfora de la naturaleza como máquina conserva su influencia sobre las prácticas vigentes de investigación experimental. La sustancia sometida a investigación tiene una función, como si se tratara de una herramienta al servicio de la finalidad humana de adquisición de conocimiento. Una muestra funciona como una de las máquinas de la naturaleza, con capacidades para generar movimiento cuando es agitada de manera suficiente por tecnologías mediadoras: los instrumentos.[3] En efecto, la propia muestra se vuelve herramienta experimental, imitando a la maquinaria artificial, funcionando unas veces como agente de cambio y otras como reactivo bajo la influencia de otros cuerpos. Sin embargo, una muestra siempre está fundada en sus capacidades propias de cambio.

La noción de Nancy Cartwright de máquina nomológica ofrece orientación. Para Cartwright, el mundo físico es un mundo de máquinas nomológicas. A cada máquina subyacen capacidades estables que se pueden ensamblar y reensamblar para formar distintas máquinas nomológicas (Cartwright, 1999, p. 52). Las capacidades de una máquina dan origen a la clase de comportamiento regular que representamos en nuestras leyes científicas (Cartwright, 1999, p. 49). En la mecánica clásica, atracción, repulsión, resistencia, presión y tensión son capacidades que se ejercen cuando una máquina funciona bien. Las máquinas del siglo XVII se caracterizaban por su poder de transmitir o modificar acciones iniciadas en otra fuente (mecánica). Los filósofos mecanicistas de la era moderna encontraron en las máquinas de la naturaleza la capacidad de transmitir o modificar una acción iniciada en una fuente externa. La filosofía mecanicista de Robert Hooke nació de asombrosos adelantos en la fabricación de lentes, lentes de aumento y microscopios. Hooke afirmó que el Gran Relojero creó el universo como Máquina Cósmica, en la cual había máquinas pequeñas incorporadas a otras mayores. En el siglo XVIII estas imágenes mecánicas, de relojería, de la naturaleza fueron desplazadas por adelantos técnicos como la máquina de vapor y avances de la electrónica. A las entidades y actividades de un mecanismo biomolecular subyacen propiedades productivas que son causalmente responsables de la ocurrencia de un estado en un organismo (Rothbart, 1999). Los "lazos" ontológicos "que vinculan" sucesos causales con efectos son las capacidades de determinadas entidades que emanan de un mecanismo generador (Harré y Madden, 1977, p. 11).

Conclusión

Detrás de la MET hay técnicas de manipulación y producción. Conforme avanzan las técnicas instrumentales, los objetos sometidos a investigación se vuelven cada vez más distantes para los experimentadores: distantes en el espacio y en el tiempo, distantes, en último término, debido a su carácter ajeno a las leyes del mundo macroscópico en que vivimos (Pomian, 1998, p. 228). En el intento de compensar la "distancia" en aumento entre el experimentador y la muestra, los experimentadores presuponen que la porción del mundo sometida a investigación está dotada de las mismas clases de capacidades que los diseñadores atribuyen a sus creaciones. Los experimentadores no se acercan a los fenómenos experimentales más allá que mediante una secuencia de señales analíticas, y tal secuencia no debería confundirse con estados físicos. Las señales analíticas nunca llegan a depurarse del todo de evaluaciones extraídas de las técnicas instrumentales. La decisión de aceptar la realidad de un fenómeno experimental sigue a la solución de un problema de optimización, en los esfuerzos por maximizar la proporción entre señal y ruido, S/R. Tal solución requiere juicio, evaluación y crítica en relación con las metas de la recuperación de información (Rothbart, 2000). Sin embargo, este aserto no implica que tales reacciones estén inherentemente contaminadas, estropeadas o distorsionadas por los aspectos del diseño experimental orientados a metas. Por el contrario, los efectos dañinos del ruido están en conflicto con las metas de un experimentador, pero nunca están del todo ausentes del escenario (Coor, 1968).

En su confianza en la física del efecto túnel de electrones, Binnig y Röhrer ilustran un aspecto importante de la instrumentación en general: la inseparabilidad del diseño tecnológico y el empeño ontológico. La tecnología se define a través de modelos de procesos del mundo real que a su vez son cognoscibles mediante una investigación tecnológicamente mediada. En este sentido, a los planos de diseño de esta y otras técnicas instrumentales subyace una unidad de mentes y herramientas.

BIBLIOGRAFÍA

Atkins, P. W., *Physical Chemistry*, W. H. Freeman, San Francisco, 1978.

Binnig, G., y H. Röhrer, *United States Patent: Scanning Tunneling Microscope. August 10, 1982*, patente de invención núm. 4 343 993, cesionario IBM, Armonk, Nueva York, 1982.

———, y H. Röhrer, "The Scanning Tunneling Microscope", *Scientific American*, vol. 253, núm. 2, agosto, 1985, pp. 50–56.

———, *et al.*, "Tunneling through a Controllable Vacuum Gap", *Applied Physics Letters*, vol. 40, núm. 2, 1982, pp. 178-180.

Bonnel, D. (ed.), *Scanning Tunneling Microscopy and Spectroscopy: Theory, Techniques and Applications*, VCH Publishers, Nueva York, 1993.

Bradbury, S., *The Evolution of the Microscope*, Pergamon Press, Oxford, 1967.

Brock, W., *Chemistry*, W. W. Norton, Nueva York, 1992.

Brown, H., "Galileo on the Telescope and the Eye", *Journal of the History of Ideas*, vol. 46, núm. 4, octubre-diciembre, 1985, pp. 487-501.

Brown, J. R., *The Laboratory of the Mind*, Routledge, Nueva York, 1991.

Cartwright, N., *The Dappled World: A Study of the Boundaries of Science*, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.

Charleston, R. J., y L. M. Angus-Butterworth, "Glass", en C. Singer, E. J. Holmyard, A. R. Hall y T. I. Williams (eds.), *A History of Technology*, vol. III, *From the Renaissance to the Industrial Revolution c. 1500-c. 1750*, Oxford University Press, Nueva York, 1957, pp. 206-244.

Chen, C. J., *Introduction to Scanning Tunneling Microscopy (Oxford Series in Optical and Imaging Sciences*), Oxford University Press, Nueva York, 1993.

Coor, T., "Signal to Noise Optimization in Chemistry – Part One", *Journal of Chemical Education*, vol. 45, núm. 7, 1968, pp. A535-A542.

Drechsler, M., "Erwin Müller and the Early Development of Field Emission Microscopy", *Surface Science*, vol. 70, núm. 1, 1978, pp. 1-18.

Ferguson, E., *Engineering and the Mind's Eye*, The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1992.

Gooding, D., *Experiments and the Making of Meaning*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1990.

Hacking, I., *Representing and Intervening*, Cambridge University Press, Cambridge, 1983.

Harré, R., *Principles of Scientific Thinking*, University of Chicago Press, Chicago, 1970.

———, y E. H. Madden, *Causal Powers*, Blackwell, Oxford, 1977.

Hooke, R., *Micrographia: or Some Physiological Descriptions of Minute Bodies Made by Magnifying Glasses with Observations and Inquiries thereupon*, Dover Publications, Nueva York, 1961.

Magonov, S. N., y M. Whangbo, *Surface Analysis with STM and AFM: Experimental and Theoretical Aspects of Image Analysis*, VCH, Nueva York, 1996.

Morrison, M., y M. Morgan (eds.) *Models as Mediators: Perspectives in Natural and Social Science*, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.

Müller, E. W., y T. T. Tsong, *Field Evaporation: Field Ion Microscopy*, American Elsevier Publishing, Nueva York, 1969.

Paneth, F. A., "The Epistemological Status of the Chemical Conception of Element", partes I y II, *The British*

Journal for the Philosophy of Science, vol. 13, núms. 49 y 50, mayo y agosto, 1962, pp. 1-14, 144-160.

Pomian, K., "Vision and Cognition", en C. A. Jones y P. Galison (eds.) *Picturing Science/Producing Art*, Routledge, Nueva York, 1998.

Price, D. J., "The Manufacture of Scientific Instruments from c. 1500 to c. 1700", en C. Singer, E. J. Holmyard, A. R. Hall y T. I. Williams (eds.), *A History of Technology*, vol. III, *From the Renaissance to the Industrial Revolution c. 1500-c. 1750*, Oxford University Press, Nueva York, 1957, pp. 620-647.

Rothbart, D., "On the Relationship between Instrument and Specimen in Chemical Research", *Foundations of Chemistry*, vol. 4, núm. 3, 1999, pp. 255-268.

———, "Substance and Function in Chemical Research", en N. Bhushan y S. Rosenfeld (eds.), *Of Minds and Molecules: New Philosophical Perspectives on Chemistry*, Oxford University Press, Oxford, 2000, pp. 75-89.

———, "The Design of Instruments and the Design of Nature", en H. Radder (ed.), *The Philosophy of Scientific Experimentation*, University of Pittsburgh Press, Pittsburgh, Pensilvania, 2003, pp. 236-254.

Schummer, J., "The Chemical Core of Chemistry I: A Conceptual Approach", *Hyle. An International Journal for the Philosophy of Chemistry*, vol. 4, núm. 2, 1998, pp. 129-162.

Shapin, S., y S. Schaffer, *Leviathan and the Air-Pump: Hobbes, Boyle, and the Experimental Life*, Princeton University Press, Princeton, 1985.

Skoog, D. A., y J. J. Leary, *Principles of Instrumental Analysis*, Harcourt Brace Jovanovich College Publisher, Fort Worth, Texas, 1992.

Suckling, C. J., K. E. Suckling y C. W. Suckling, *Chemistry through Models: Concepts and Applications of Modeling in Chemical Science*, Cambridge University Press, Nueva York, 1978.

Waller, R. (ed.), *The Posthumous Works of Robert Hooke*, Frank Cass, Londres, 1705.

Zielonacka-Lis, E., "Research Practice of Modern Bioorganic Chemistry and the Erotetic Conception of Explanation", en N. Psarros y K. Gavroglu (eds.), *Ars Mutandi. Issues in Philosophy and History of Chemistry*, Lepziger Universitätsverlag, Leipzig, 1999, pp. 153-157.

---

[*] Departamento de Filosofía, Universidad George Mason, Fairfax, Virginia, EUA.

[**] Departamento de Química y Bioquímica, Universidad George Mason, Fairfax, Virginia, EUA.

[1] En *The Posthumous Works of Robert Hooke* escribe: "La misión de la filosofía es descubrir un conocimiento perfecto de la naturaleza y las propiedades de los cuerpos y de las causas de los productos naturales […]" (Waller, 1705, p. 3).

[2] El argumento más convincente sobre la centralidad de la modelización en la ciencia aparece en Rom Harré, 1970. Morrison y Morgan recientemente han contribuido a este tema en el capítulo "Models as Mediating Instruments", libro del que son coeditores (1999).

[3] Concepción causal de sustancia propuesta en el importante trabajo de Eva Zielonacka-Lis (1999), a quien agradezco sus valiosas e inspiradoras discusiones sobre el tema.

SÉPTIMA PARTE

LA QUÍMICA Y LA ONTOLOGÍA

XVII. ¿SON LAS CLASES QUÍMICAS CLASES NATURALES?

NALINI BHUSHAN*

Introducción

El concepto de clase natural a menudo se invoca para dirimir debates en filosofía de la ciencia y en metafísica, debates que suscitan escepticismo sobre una diversidad de nuestras prácticas, tales como la justificabilidad del razonamiento inductivo, la proyectabilidad de predicados o el significado correcto de algunos de nuestros términos. Así, por ejemplo, son predicados proyectables sólo aquellos que son verdaderos de los términos de clase natural,[1] siendo éstos los que pueden figurar en leyes naturales. La literatura de clases naturales en filosofía, de modo característico, ha identificado clases naturales con clases químicas. ¿Son las clases químicas clases naturales? La respuesta puede parecer obvia: ¡por supuesto que lo son! De hecho, sería perfectamente razonable suponer que si hubiera clases candidatas ideales a clases naturales, serían clases químicas como el oro y el H_2O. Esto no es de extrañar, porque si hubiera propiedades de objetos naturales que pudieran considerarse esenciales para su constitución, las más probables parecerían ser las propiedades químicas, al ser las candidatas menos controvertidas.[2] Aunque los filósofos han usado clases zoológicas (tigres, el *Homo sapiens*), botánicas (olmos, hayas) y hasta psicológicas (colores como el rojo y el amarillo) como ejemplos de clases naturales, predominan los ejemplos químicos. Y aunque cabría esperar un debate en cuanto a si la mente es una clase natural o si la leche o los tigres o las especies son clases naturales, el campo de las clases químicas en general parece no estar sujeto a un cuestionamiento serio.

En este trabajo repaso brevemente parte de la historia contemporánea del papel de las clases químicas en el argumento a favor de las clases naturales; doy algunos motivos de escepticismo usando como caso de estudio el área de la síntesis química: el diseño de moléculas, y, por último, bosquejo las líneas generales de un enfoque alternativo de las clases en química. En este contexto contrasto la nueva teoría de la referencia, a la que dieron respetabilidad Kripke y Putnam, con la convencionalidad de la referencia popularizada por Quine, y arguyo que Quine tenía razón en su escepticismo ante las clases naturales, aunque se equivocó en su descripción de ellas. Sin embargo, disiento de él al optar por el particularismo,[3] antes que por el convencionalismo, respecto a las clases. Así, lo que propongo es una clase para cada caso: las clases son reales, pero particulares del caso de los individuos que deciden trabajar con ellas, de sus elecciones de modelos y estrategias, y de lo que resulta funcionar mejor en el ámbito en cuestión. En química, esto significa en términos muy generales que una clase podría ser una sustancia, o un conjunto de propiedades molares, o un aspecto microestructural. Para dar un ejemplo más específico, los químicos podrían considerar que un complejo ligando-receptor es una clase química (o bioquímica) porque se ajusta mejor a un sitio particular, es funcional, o es "correcto" en algún sentido que no se reduce a concebirlo como natural. Aunque la agrupación no es natural en ningún sentido no problemático de la palabra, es real antes que (meramente) convencional.

La postura del particularismo desafía una dicotomía tradicional que, por burda y trillada que parezca, sigue ejerciendo una influencia poderosa en la psique. Es la

dicotomía entre lo que se descubre (o es esencial o real o natural) y lo que se construye (o es convencional o creado).[4] Hay aquí sin duda una interesante lección sociológica y psicológica que no estoy del todo preparada para dar: ciertamente ha sido útil (y quizá sea prácticamente indispensable) tener colgaderos gemelos como éstos en los cuales colocar dos constelaciones distintas de ideas que resuenan juntas. Así, abandonar la "imagen de descubrimiento" (LaPorte, 1996) no es abandonar sólo una burda teoría popular, sino una sensibilidad profundamente penetrante —un modo de pensar sobre las entidades en cuanto se relacionan con su entorno; un modo de abordar soluciones de problemas— de método, de modelización, de categorización; un modo de encontrar sentido a la propia relación con el mundo y a la propia posibilidad de alterarlo.

Considerar seriamente la noción de hacer en la síntesis eficaz de un abanico de moléculas que van de lo totalmente nuevo a lo que ya existe en abundancia en la naturaleza, es abandonar la dicotomía de descubrimiento y creación, a causa no de un argumento lógico en el sentido de que todo básicamente se crea o se construye (como algunos han argüido), sino de que la practiquísima lección del caso de la síntesis química es que ¡literalmente no hay diferencia alguna entre lo que se descubre y lo que se crea!

¿Qué hace de algo una *clase*? ¿Y qué hace que una clase sea *natural*? Aunque la primera pregunta es interesante para efectos de este trabajo, presupondré que podemos dar una respuesta relativamente poco problemática en relación con agrupaciones de objetos atendiendo a alguna propiedad prominente o conjunto de ellas. Lo que me preocupa aquí es la segunda pregunta. La literatura filosófica tradicionalmente ha reconocido dos tipos de distinción: *a*) grupos naturales frente a grupos arbitrarios de objetos y *b*) grupos naturales frente a grupos artificiales de objetos. ¿Qué justifica estas distinciones? En el primer caso, la idea es que hay alguna propiedad teóricamente importante que comparten los miembros del grupo "natural"; en el segundo, natural se entiende por "existente naturalmente" (que se encuentra en la naturaleza).[5] Un poco de reflexión sobre el sentido de "natural" entendido en *a*, sin embargo, muestra que éste no bastará para darnos clases naturales. Si el aspecto prominente es alguna propiedad teóricamente importante no especificada de otra manera, se podría concebir un grupo arbitrario de objetos que comparten una propiedad teóricamente importante bajo alguna teoría creada. Así, sería posible que todas las cosas fueran parte de un grupo, siempre y cuando se pudieran ofrecer "aspectos" en los cuales se relacionan. No es útil requerir que la propiedad sea proyectable, porque este requerimiento se satisfaría bajo la teoría creada.

Sostengo que es la distinción del tipo *b* a la que se ha recurrido *de facto* para responder al escéptico: "natural" entendido como la existencia de la agrupación (que comparte una propiedad teóricamente importante) *en la naturaleza*. En otras palabras, *b* implica a *a* en que si la agrupación existe en la naturaleza, se sigue que debe de haber alguna propiedad teóricamente importante que sus miembros comparten. Sin embargo, lo inverso no es válido, o sea, no se sigue que el compartir una propiedad teóricamente importante implique una agrupación natural. Como explica Guttenplan: "Para entender el concepto de clase natural hay que centrarse en la diferencia entre clases representadas por el conjunto de máquinas de escribir y clases representadas por el conjunto de tigres" (Guttenplan, 1994, p. 449). Su elección de ejemplos es reveladora de la clase de distinción que en realidad cumple la función de articular el concepto de clase natural. Las máquinas de escribir presumiblemente comparten alguna propiedad teóricamente importante que explica su funcionamiento y con la que se puede predecir su comportamiento, pero no existen en la naturaleza. Como son artefactos, no son materia para clases naturales.

No es de extrañar, pero cuando se subraya lo dicho antes sobre el sentido de natural que realmente interviene en la noción de clase natural, la creencia en las clases naturales tiende a ir de la mano con la creencia en una forma sólida de realismo y en contra de la mayoría de las formas del convencionalismo. Vuelvo a citar a Guttenplan: "Lo que es decisivo de la noción de clase natural es que las propiedades compartidas tienen *independencia* de cualquier modo humano concreto de concebir a los miembros de la clase" (1994, p. 450; las cursivas son mías). Este estrecho vínculo entre clases naturales y realismo se ha controvertido relativamente poco, porque si la agrupación de objetos es "natural", entonces es razonable inferir que hay propiedades subyacentes que en efecto existen y son compartidas, aunque todavía no sepamos cuáles son. Esta forma de realismo es sólida en cuanto que es más fuerte que una postura realista que, por ejemplo, insiste en contingencias de diversa índole —histórica, social, teórica, individual— al encontrar sentido a cualquier clase de afirmación de existencia. Tal realismo también tiende a ser universalista en la medida que está a favor de la existencia de objetos con un conjunto determinado de propiedades independientemente de las particularidades de las circunstancias. Tales propiedades universales pueden, sin embargo, ser contingentes en un aspecto específico: en cuanto a cómo es el mundo en realidad.

La opinión de que las cosas poseen esencia tiene una muy larga historia en la literatura filosófica, y se remonta hasta Aristóteles. Según la opinión aristotélica, hay especies de cosas con la posibilidad inherente de sufrir diversas clases de "cambio" (dependiendo de distintas clases de causa), como con arreglo a leyes. Estos cambios (y las causas en que se fundan) son diferentes aspectos de un mismo principio generador subyacente que define la especie de cosa (la sustancia) —sus condiciones de identidad— y que constituye sus condiciones de persistencia. Aquí encontramos la primera vinculación entre sustancias (lo que algunos han tomado como sinónimo de clases reales o naturales [Millikan, 2000]) y esencialismo.

La creencia en las esencias (y en la empresa metafísica más generalmente) sufrió un duro revés con el ataque de la lógica positivista a la inteligibilidad de entidades que no estaban abiertas a verificación. ¿Qué eran en todo caso estas esencias, si se entendían como algo adicional a todas las propiedades observables? Es de interés que el concepto haya experimentado un renacimiento en los años setenta y ochenta con Putnam (1975) y Kripke (1980), a medida que la idea de esencia se disociaba sistemáticamente del aparato conceptual precedente y se vinculaba en lo específico con las propiedades microscópicas sancionadas por la ciencia, poseídas por los objetos y agrupadas por tales propiedades en clases naturales. Sober articula así una opinión hoy relativamente poco controvertida entre los filósofos: "El *esencialismo* es una opinión filosófica convencional sobre las clases naturales. Sostiene que cada clase natural se puede definir en relación con propiedades que son poseídas por todos los miembros de esa clase y sólo por ellos" (Sober, 1993, p. 145). Así, una clase natural requiere una propiedad que es tanto necesaria como suficiente para ser miembro de ella. Puede haber propiedades o conjuntos de propiedades que justifiquen la agrupación de individuos como automóviles, estudiantes o juegos, esto es, en cuanto clases, pero nadie (después de Wittgenstein, en todo caso) querría argüir que estas propiedades son *esenciales* de estas clases, porque siempre es posible imaginar que puede llegar a haber un nuevo modelo de coche o un juego recién inventado al que le falte esa propiedad o conjunto de propiedades (aunque acaso no podamos presentar automóviles o estudiantes o juegos que carezcan de dichas propiedades). Además, no es posible limitarse a estipular, esto es, acordar por convención, la condición necesaria y suficiente de dicha propiedad. Para empezar, podría ser contingente que el objeto (p. ej., el agua) exista, pero dado que existe, tiene necesariamente esa propiedad (su cualidad de H_2O) (Kripke, 1980). Es decir, la propiedad en efecto debe, en cierto modo, ser inherente al objeto. El concepto de clase natural se distingue, pues, del de mera clase por su vínculo con la tesis metafísica del esencialismo.

Hay así una constelación de conceptos que están tradicionalmente entrelazados: esencialismo, realismo y necesidad. Sidelle (1989), por ejemplo, usa casi como intercambiables los conceptos de esencia y necesidad;[6] el concepto dominante que justifica estos vínculos es el de clase natural. ¿Qué justifica el empleo de esta categoría

vital?

La literatura de clases naturales en filosofía ha estado dominada por experimentos mentales, creados por Putnam y Kripke, que han vinculado la noción de clases naturales con la posesión de propiedades esenciales. Por ejemplo, el famoso experimento mental de Putnam de la Tierra gemela se vale del agua (o la cualidad de H_2O del agua) como componente decisivo de su argumento a favor de tener en cuenta propiedades de "estructura profunda" de un objeto natural en el significado del término que sirve para discernirlo. Así, el significado del término "agua" no se agota en la descripción "sustancia que es incolora, inodora, corre en los ríos, quita la sed", etc.; además, y a la luz del famoso experimento mental, decisivamente la cualidad de H_2O del agua, al ser esencial para su constitución, también es esencial para su significado.[7]

Aquí tenemos una fundamentación de la dicotomía de propiedades: las contingentes, propiedades de superficie o molares representadas en nuestras descripciones de lo que vemos, tocamos, sentimos, oímos u olemos, y las propiedades esenciales inherentes a la naturaleza de las cosas mismas, independientes de nuestras percepciones. Las propiedades esenciales son reales, pero no viceversa, porque las propiedades reales pueden ser esenciales o contingentes; estas últimas pueden ser transitorias o pasajeras o relacionales en cierto aspecto, pero son reales a pesar de todo.

Muchos en la filosofía de la ciencia han criticado este vínculo entre clases naturales y esencialismo, pero curiosamente suele hacerse una excepción cuando el tipo de clase natural en discusión es una clase química. Sucede así que muchos filósofos no respingan cuando Sober (1993), en una sección que tiene el provocador título de "La muerte del esencialismo", arguye que el esencialismo *no* es una opinión admisible sobre las especies biológicas porque los biólogos no defienden la noción de clase natural en que se basa, y al mismo tiempo declara, casi de paso: "El esencialismo es defendiblemente una doctrina admisible sobre los elementos *químicos*" (p. 146; las cursivas son mías).

Dicho lo anterior, existe un cuerpo de literatura que critica las pruebas que los experimentos mentales arrojan sobre la existencia de clases *químicas* como clases naturales. Las críticas adoptan diversas formas. Mencionaré unas cuantas, principalmente para ofrecer un contraste con la línea de crítica que adopto en este trabajo. Una tiene que ver con la metodología de los experimentos mentales: "¿Quién sabe qué debemos decir en una situación tan fantástica?" (Dupré, 1981, p. 71). Otra pone en duda la existencia de entidades puras como el oro o el agua, arguyendo que estos términos de hecho no pueden referirse a una sola composición microestructural (objeción de las impurezas) (Aune, 1994). Una tercera y más reciente crítica es que los significados de nuestros términos de clase química suelen ser indeterminados (LaPorte, 1996). Según LaPorte, "los casos paradigmáticos de una clase comparten muchas propiedades, macro- y micro-; cuál de éstas define las clases es una cuestión que siempre seguirá siendo indeterminada hasta cierto punto" (LaPorte, 1996, p. 115). Las agrupaciones en clases se producen sobre la base de una relación de semejanza que se elige entre un abanico de posibles relaciones de semejanza y que podría darse o bien al nivel molar o bien al molecular. Si

es así, las agrupaciones no son en clases “naturales” en sentido claro y no problemático alguno.[8] (Esta atención a los juicios de semejanza como base de las agrupaciones es muy del estilo de Quine, punto al que volveré, para coincidir con él, más adelante.)

Un objetivo del presente ensayo es contribuir a este cuerpo de literatura crítica sobre las clases químicas, pero desde un ángulo distinto. Considera las repercusiones de la síntesis química en la división entre natural y no natural. El punto es tan sólo que las propiedades de los compuestos sintéticos pueden satisfacer los criterios tan fácilmente como los compuestos que existen en la naturaleza, y por tanto que el vínculo intuitivo entre esencias (o necesidades o rigideces) y clases naturales de hecho no está garantizado. Tomemos por ejemplo las proteínas de síntesis natural frente a las de síntesis artificial que por lo demás son idénticas a las primeras. ¿Son unas una clase natural y las otras no? ¿Cuál es la base de categorización?

¿Podría una mirada más detenida a las implicaciones de la posibilidad de síntesis química aportar nuevas intuiciones a la discusión sobre clases naturales?[9] Así lo creo. La investigación de clases naturales ha procedido históricamente con independencia de considerar las implicaciones de la posibilidad de síntesis. Cavilar en lo que significa crear entidades a nivel microscópico como hacen los químicos, entidades que se comportan en todo como las análogas que existen en la naturaleza, nos obliga a reevaluar el peso concedido tradicionalmente por los filósofos a las clases naturales (o que existen en la naturaleza). La finalidad de esta sección es plantear preguntas sobre la práctica filosófica de identificar automáticamente clases naturales con clases químicas. Si el razonamiento es convincente, debería inclinar al lector a repensar la naturalidad de ser una especie de realista también en el campo de la química.

Consideremos los siguientes tres casos de síntesis química:

1) Compuestos sintéticos que tienen un análogo en la naturaleza. Tomemos, por ejemplo, las proteínas de síntesis natural frente a las de síntesis artificial que por lo demás son idénticas a las primeras.

2) Compuestos sintéticos que no tienen análogo natural. Este grupo podría incluir moléculas cuyo análogo es un objeto macroscópico complejo (frenos, interruptores, ruedas dentadas),[10] moléculas cuyo análogo es un objeto conceptual o matemático (sólidos platónicos), moléculas cuyo análogo es un objeto macroscópico de atractivo estético, moléculas de las que no hay análogo y cuya estructura misma tiene atractivo estético. Por ejemplo, el pentaciclo[$4.2.0.0^{2,5}.0^{3,8}.0^{4,7}$]octano, también llamado cubano, tiene ocho carbonos dispuestos como los vértices de un cubo. El cubano, sintetizado por primera vez en 1964 (Eaton y Cole, 1964), no existe en la naturaleza, y en el momento de su síntesis no se sabía ni se preveía qué uso podía tener.

3) Un compuesto que primero se sintetiza y luego se descubre en la naturaleza. En este caso hay dos posibilidades: *a*) que el compuesto ya estuviera presente en el ambiente, y *b*) que se haya introducido recientemente en él, pero por medios "naturales". Por ejemplo, en 1985 se sintetizó un compuesto hoy llamado buckminsterfullereno, un compuesto de 60 carbonos en el que éstos se encuentran en los vértices de anillos de cinco y seis miembros colocados como pentágonos y hexágonos en la superficie de un balón de futbol. Después se encontró buckminsterfullereno entre los componentes del hollín, incluidas muestras antiguas de hollín.

En todos estos casos, ¿cuál es la relación entre las moléculas sintéticas y sus análogas existentes en la naturaleza? Es una cuestión todavía pendiente de discusión en la literatura filosófica, presumiblemente porque la respuesta se ha dado por obvia: todas ellas, sintéticas o no, son de una misma clase, ya que las sintéticas son indistinguibles de

las “naturales”. Sin embargo, no parece nada obvio que así sea, una vez que se consideran detenidamente, por una parte, la noción de clase natural de que se trata y, por la otra, la medida de “hacer” implícita en la síntesis y a qué nivel se produce. ¿Cuál es, pues, la base de categorización?

Parece que se puede adoptar una de las siguientes posturas:

a) Afrontar la situación y proceder a estipular que clase natural significa que existe en la naturaleza, pero esto ahora parece *ad hoc* en vista de la indistinguibilidad entre los compuestos naturales y los sintéticos.

b) Ampliar la noción de clase natural de modo que ahora comprenda las cosas que existen en la naturaleza y las que son idénticas a ellas. Esta táctica tiene algunas posibilidades. Sin embargo, ¿qué hay de una molécula sintetizada *primero* por seres humanos (y por tanto no existente en la naturaleza) y luego creada por una planta o animal (caso *3b* citado)? ¿Cambia su categoría en ese momento y se vuelve clase natural donde antes no lo era? Se podría responder concediendo que algunos compuestos químicos no son clases naturales —los sintéticos que no existen en la naturaleza quizá—, pero mantener la intuición básica de que los ejemplos pragmáticos de clases naturales son, aun así, clases químicas. No obstante, esta estrategia no es convincente, porque hay un aspecto adicional de las clases químicas que las distingue de sus análogas zoológicas y botánicas: quizá podamos sintetizar cualquier compuesto químico. No ocurre lo mismo en el caso de los demás ejemplos de clases naturales. Hay por tanto un sentido en el que, lejos de ser paradigmáticas, las clases químicas plantean en efecto más dudas en cuanto clases naturales que sus primas zoológicas, botánicas y psicológicas.

c) Concluir que la categoría de clase natural es, de origen, dudosa.

En los casos *1-3* que se consideraron antes, todo intento de categorización parece problemático. Estamos tentados de seguir el camino de *c*, esto es, abandonar la categoría de clase natural como básica desde el punto de vista explicativo, epistemológico u ontológico. De hecho, los filósofos han adoptado críticas del tipo *c* —que no se puede alcanzar un criterio adecuado para separar las clases naturales de las no naturales—, pero con fundamentos independientes de las implicaciones de la síntesis química. Siguiendo un camino distinto, esto es, explorando la naturaleza de la síntesis y sus productos, hemos mostrado aquello en lo que se equivoca una categorización metafísica que considera central el concepto de clase natural.

He argüido que la posibilidad de “sintetizar” a nivel químico sirve para borrar la división entre natural y artificial. Esto tiene tres consecuencias:

1) Las clases químicas no son los casos no problemáticos, paradigmáticos que se han analizado en la literatura filosófica.

2) Nos quedamos sin un ejemplo claro y sencillo de clase “natural”.

3) Las variedades del realismo, que están estrechamente vinculadas con las clases

naturales, han dejado de ser la postura de *statu quo* que ha de adoptarse automáticamente hacia la química.

En contraste con el concepto de clase natural bosquejado antes, propuesto por los escritos de Kripke y Putnam, el sentido que Quine da a la expresión “clases naturales” en su trabajo del mismo título (Quine, 1969) ha de entenderse como “clases que se presentan a la conciencia naturalmente, esto es, de manera instintiva o innata”. Según este sentido de la expresión, las clases químicas serían un subconjunto de clases naturales al ser las clases teóricamente más sofisticadas que pueden encontrarse en las ciencias; paradójicamente, pues, las menos naturales en el sentido de que se presentan a la mente de la manera menos natural. Además, el sentido que Quine da a clases tampoco tiene relación con el esencialismo. Para él, una clase es consecuencia de un juicio de semejanza que estamos predispuestos a hacer de manera innata, y no consecuencia de agrupaciones que sean en cierto modo un aspecto esencial del mundo natural. En su trabajo “Natural Kinds” Quine propone, sin embargo, que en lo concerniente a la ciencia de la química no surgen preguntas sobre categorización, ya que las “condiciones estructurales” de los mecanismos en cuestión son totalmente conocidas y no controvertidas. En un trabajo anterior (Rosenfeld y Bhushan, 2000) argüimos en contra de Quine que la categorización es una cuestión viva en química, y nos valemos del área de la síntesis para mostrar de qué manera es así. Aquí registramos este hecho para devolver las clases químicas al redil de las clases que se nos presentan de manera innata. Esto es, el fundamento de las agrupaciones en química es cuestión tanto de aquello que parece ir en conjunto como de otros ámbitos. Quine se equivocó al hacer de la química una excepción.

El concepto de semejanza en la organización de bibliotecas combinatorias de compuestos en química tiene raíces mayormente pragmáticas (Wilson, 1998). De hecho, el sentido en que dos compuestos se consideran semejantes depende del contexto. Por ejemplo, se podría querer encontrar compuestos similares a un compuesto dado en cuanto a su capacidad para enlazarse con un receptor específico (porque esto podría ser un indicador de ciertas propiedades farmacológicas). Aquí, la colocación de varios grupos funcionales, los sitios de enlace, se vuelve la característica decisiva de comparación, y se trata por tanto de una semejanza puramente estructural en la que los aspectos importantes de estructura son cosas como la distancia entre dos grupos funcionales. Un tipo distinto de descriptor podría ser un conjunto de propiedades tales como si en la estructura se incluye un anillo aromático, un átomo de cloro, etc. Entre las propiedades elegidas podrían contarse incluso propiedades molares como la solubilidad. En cierto modo, y para extender un poco más la metáfora de la biblioteca, podría pensarse en el conjunto de todos los descriptores de un compuesto específico como en las palabras usadas en una búsqueda (por computadora) en una biblioteca de libros.

La semejanza es un concepto sólido muy usado por los químicos, pero que en muchos casos es intuitivo y no la versión matemática de la que habla Quine. Es cierto que la semejanza muy bien podría definirse en sentido estricto y cumplir los criterios de rigor

que Quine exige. La noción de distancia de reacción es un ejemplo que ilustra lo anterior. Aquí, la referencia a la distancia de reacción en términos matemáticos sustituye a la semejanza, tal como requiere Quine. Sin embargo, esta expresión cuantitativa de semejanza de estructura emplea como vehículo procesos (llamados reacciones unitarias) que interconvierten estructuras, y sin duda ésta no es la única manera de formular la semejanza estructural. Para ver cómo el medio de comparación usado aquí forma parte integral de las preocupaciones específicas de los químicos, comparemos esta situación con la siguiente analogía macroscópica. Podríamos comparar un pantalón con una bolsa y considerarlos semejantes por el hecho de que para interconvertirlos bastaría cortar las perneras del pantalón y coser los agujeros del calzoncillo resultante. Sin embargo, esto parece una base arbitraria de semejanza (entre pantalones y bolsas), aunque la "interconversión" sea directa. El que los químicos de hecho usen la interconversión como marca de semejanza por su utilidad en la síntesis no significa, pues, que no haya otros indicadores, quizá mejores, de semejanza química. Así, hay una necesidad real de discutir y evaluar en qué "aspectos" puede decirse que dos moléculas son semejantes.

Aunque hemos visto que se puede formular un argumento convincente a favor de seguir usando una gama de juicios de semejanza en química, la clase de convencionalismo que Quine defiende, sin embargo, no se ajusta satisfactoriamente al tipo de función que las clases cumplen en química. Aunque elegir la clase entre un espectro de agrupaciones posibles depende del contexto, las clases figuran en narraciones causales y explicativas, y por lo mismo son reales, aunque específicas de los intereses y las historias de los individuos de que se trate, y de los modelos y estrategias concretos que eligen para resolver sus problemas. Mi pálpito es que el particularismo propuesto por Cartwright en un trabajo reciente (Cartwright, 1999) puede ser una buena manera de encontrar sentido a las clases en química.

Conclusión

El argumento de este trabajo en contra de tomar las clases químicas por clases naturales tiene dos partes:

1) Registra la situación empírica: que los químicos usan juicios de semejanza al agrupar elementos, como hacen los practicantes de otras disciplinas. Quine se equivoca al hacer de la química una excepción. Las clases no existen naturalmente en *ninguna* disciplina. Además, los juicios de semejanza usados por los químicos varían de un caso a otro.

2) Subraya la significación filosófica de la posibilidad misma de síntesis química. La síntesis orgánica da por resultado la creación de compuestos idénticos a otros que se encuentran en la naturaleza. Esto socava de manera interesante el modelo de descubrimiento. La idea no es que en realidad nunca se descubran entidades (idea que se ha expresado varias veces en la literatura); antes bien, dado que a las entidades que existen naturalmente se pueden equiparar las obras y diseños del químico orgánico sintetizador, ya no hay justificación alguna para el peso explicativo u ontológico adicional que se da a las clases naturales (o naturalmente existentes). Si es así, en la expresión "clases naturales" el acento debe trasladarse a las clases y a una búsqueda de variedades de clases independientes de la división entre naturales y convencionales.

Mi propuesta es que acudamos al particularismo como alternativa en la referencia a términos de clase.[11]

BIBLIOGRAFÍA

Aune, B., “Determinate Meaning and Analytic Truth”, en G. Debrock y M. Hulswith (eds.), *Living Doubt*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1994, pp. 55-65.

Carpenter, B., “Models and Explanations: Understanding Chemical Reaction Mechanisms”, en N. Bhushan y S. Rosenfeld (eds.), *Of Minds and Molecules: New Philosophical Perspectives on Chemistry*, Oxford University Press, Nueva York, 2000, pp. 211-229.

Cartwright, N., *The Dappled World: A Study of the Boundaries of Science*, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.

Dupré, J., “Natural Kinds and Biological Taxa”, *The Philosophical Review*, vol. 90, núm. 1, 1981, pp. 66-90.

Eaton, P. E., y T. W. Cole, “The Cubane System”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 86, núm. 5, 1964, pp. 962–964.

Goodman, N., *Fact, Fiction and Forecast*, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1955.

Guttenplan, S., “Natural Kind”, en S. Guttenplan (ed.), *A Companion to the Philosophy of the Mind*, Blackwell, Oxford, 1994.

Kripke, S., *Naming and Necessity*, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1980.

LaPorte, J., “Rigidity and Kind”, *Philosophical Studies*, vol. 97, núm. 3, 2000, pp. 293-316.

———, “Chemical Kind Term Reference and the Discovery of Essence”, *Noûs*, vol. 30, núm. 1, 1996, pp. 112-132.

Millikan, R., *On Clear and Confused Ideas*, Cambridge University Press, Cambridge, 2000.

Putnam, H., *Philosophical Papers*, vol. 2: *Mind, Language, and Reality*, Cambridge University Press, Cambridge, 1975.

Quine, W. V. O., *Ontological Relativity and Other Essays*, Columbia University Press, Nueva York, 1969.

Rosenfeld, S., y N. Bhushan, “Chemical Synthesis: Complexity, Similarity, Natural Kinds, and the Evolution of a ‘Logic’”, en N. Bhushan y S. Rosenfeld (eds.), *Of Minds and Molecules: New Philosophical Perspectives on Chemistry*, Oxford University Press, Nueva York, 2000, pp. 187-207.

Sidelle, A., *Necessity, Essence, and Individuation*, Cornell University Press, Ithaca, Nueva York, 1989.

Sober, E., *The Philosophy of Biology*, Westview Press, Boulder, Colorado, 1993.

Wilson, E. K., “Computers Customize Combinatorial Libraries”, *Chemistry and Engineering News*, vol. 76, núm. 17, 27 de abril de 1998, pp. 31-37.

---

[*] Departamento de Filosofía, Smith College, Northampton, Massachusetts 01063, EUA.

[1] Así, *green* (verde) en oposición a *grue* (verdul), por ejemplo, donde *grue* (verdul) significa “observado antes de 2005 y verde, o bien azul” (Goodman, 1955).

[2] Ésta es, en general, la razón de que haya habido tan poca filosofía de la química: todas las preguntas fundamentales de la química parecen estar resueltas o al menos exentas de controversias profundas.

[3] Véase, en Cartwright (1999), una explicación y una defensa detalladas del particularismo, aunque en un contexto distinto.

[4] El atractivo de la idea de clase natural salta a la vista si se considera la pregunta de si la mente es una clase natural. Es una pregunta que invita a considerar si la mente es como es independientemente de lo que la sociedad y la cultura le han inculcado como parte integral.

[5] No distingo aquí entre la opinión de que las clases naturales son sustancias que tienen propiedades, sobre las cuales es proyectable una diversidad de predicados, y la opinión de que las clases naturales son el conjunto de propiedades mismas representadas por conceptos predicativos como ser oro o ser verde. Véase, en Millikan (2000), una excelente defensa de esta distinción y su argumento a favor de recuperar la noción aristotélica tradicional de sustancia en la discusión sobre las clases.

[6] Esto plantea una cuestión muy interesante en un debate entre el realismo y el convencionalismo, pero no vamos a tratarla aquí. Véase Sidelle, 1989.

[7] Hago notar de paso que si bien podría considerarse una pregunta abierta si la clase química ha de identificarse o no a nivel molar (agua) o molecular (H_2O), que son inherentes en cualquier caso, esto no es así para Putnam, según el cual las propiedades del nivel molar describen características superficiales que son contingentes de la clase.

[8] En un reciente trabajo LaPorte arguye que los términos de clase designan rígidamente clases abstractas (LaPorte, 2000). Según esta opinión, los términos de clase química se relacionan, y lo hacen rígidamente, pero no en virtud de distinguir clases naturales. Es una postura interesante, pero no dispongo de espacio para discutirla aquí.

[9] Esta sección sobre la síntesis química aparece como parte de un ensayo más largo titulado “Chemical Synthesis: Complexity, Similarity, Natural Kinds, and the Evolution of a ‘Logic’ ” (Rosenfeld y Bhushan, 2000).

[10] Véase, en Carpenter (2000), un ejemplo muy interesante y estimulante de “trinquete molecular”.

[11] Los particularistas son pluralistas por cuanto sostienen que hay más de una propiedad pertinente a las clases. Así, las propiedades tienen pertinencia variable. Una propiedad que hace que una entidad pertenezca a una clase en determinado contexto científico puede ser impertinente a otro. Véase un desarrollo de esta propuesta referente al particularismo en mi trabajo “What is a Chemical Property?” (de próxima publicación).

XVIII. EL AGUA *NO* ES H_2O

MICHAEL WEISBERG*

INTRODUCCIÓN

En la defensa del externalismo semántico los filósofos del lenguaje a menudo han dado por cierto que hay un nexo directo entre clases científicas y las clases naturales reconocidas por los usuarios del lenguaje corriente.[1] Por ejemplo, la afirmación de que el agua es H_2O presupone que la clase del lenguaje común agua corresponde a una clase química, cuyos miembros son todos moléculas de fórmula molecular H_2O. Este supuesto sobre la coordinación entre clases del lenguaje corriente y clases científicas es importante para el programa externalista, porque es lo que nos permite descubrir empíricamente las extensiones de los términos de clases del lenguaje común.

Aunque simpatizo con el proyecto externalista semántico, creo que la discusión de las clases químicas por filósofos del lenguaje se ha simplificado demasiado, ocultando dificultades que surgen cuando tratamos de coordinar clases científicas con las clases naturales reconocidas por los usuarios del lenguaje corriente.[2] En este trabajo examinaré tales dificultades revisando más detenidamente la noción de agua del químico.

Para ayudar a este examen, empezaré por hacer explícito un principio con el que, según creo, cuentan los externalistas semánticos. El *principio de coordinación* es la tesis de que las clases científicas y las clases naturales reconocidas por los usuarios del lenguaje natural se alinean o se pueden correlacionar entre sí una a una. Un breve examen de una imagen externalista de referencia de clases mostrará cómo se depende del principio de coordinación.

En algún momento de la historia de la humanidad, cuando alguien estaba en contacto causal con el agua, la bautizó con el nombre de "agua". Esa persona no necesitaba tener ninguna creencia correcta sobre la clase de cosa que era el agua; le bastaba asociar el término de clase "agua" con la muestra de agua que tenía ante sus ojos. Si ulteriores muestras de líquido en efecto son o no son agua depende de si son de la misma clase natural y por ello comparten la misma microestructura o esencia que la muestra original de agua. La referencia del término "agua" está fija para la comunidad de usuarios del lenguaje en virtud de los nexos causales de éstos con quien bautizó el agua. Al estar causalmente vinculada con el bautizador, la comunidad de usuarios del lenguaje está vinculada con el hecho original del bautizo. En virtud de esto, no necesitan tener ninguna creencia cierta sobre el agua para referirse a ella. Lo único que se requiere es que sean parte de una comunidad lingüística que tenga la clase apropiada de eslabones causales a través del tiempo.

Aunque ni el usuario del lenguaje común y ni siquiera el bautizador necesitan tener creencias ciertas sobre el agua para referirse a ella, alguien de la comunidad tarde o temprano necesitará tener estas creencias si el significado de "agua" ha de hacerse explícito. Las personas obvias a las cuales preguntar sobre la naturaleza del agua son los químicos, y los externalistas semánticos a menudo han dado por cierto que es ahí a donde debemos acudir. Putnam y Kripke no son muy explícitos en cuanto a los detalles del papel que los químicos representan en la semántica, pero es en este aspecto donde creo que se depende implícitamente del principio de coordinación. Los químicos

descubren las clases naturales del mundo material, a las que llamaré “clases químicas”. El principio de coordinación presume que las mismas clases que los químicos descubren son las pertinentes al lenguaje corriente. Si esto es así, entonces al describir en detalle una clase química se habrá determinado con precisión la semántica del término de clase común asociado con esa clase química. Putnam y Kripke parecen creer que en el caso del agua los químicos describen una clase química cuyos miembros comprenden todas y sólo las moléculas de fórmula molecular H_2O. Invocando este hecho y el principio de coordinación, concluyen que el agua es H_2O.

Un examen más detenido de lo que es realmente el agua, creo, muestra que, para los químicos, el agua no es sólo el conjunto de todas las moléculas de fórmula molecular H_2O. Hay múltiples clases químicas que razonablemente se podrían coordinar con la clase del lenguaje corriente agua. Como la química nos proporciona muchos tipos distintos de clases naturales, y como no nos proporciona reglas que prefieran un conjunto de clases a otro, la deferencia hacia los hallazgos de la química no nos permitirá descubrir sin ambigüedad las extensiones de los términos de clases naturales del lenguaje común. Se necesitará una versión más matizada del principio de coordinación, que tenga reglas específicas para discernir la clase química apropiada en circunstancias concretas, para llevar adelante el proyecto externalista semántico.

En un famoso pasaje Linus Pauling nos dijo que la química es "la ciencia de las sustancias: su estructura, sus propiedades y las reacciones que las cambian en otras sustancias" (Pauling, 1947). Usando un lenguaje un tanto más contemporáneo, podemos decir que la química estudia la *estructura* y la *reactividad* de las sustancias. La estructura se estudia en tres niveles compositivos. La estructura molar consiste en las propiedades macroscópicas o de gran cantidad de una sustancia. La estructura molecular es la configuración espacial de átomos conectados por enlaces químicos. La estructura atómica, desde el punto de vista químico, comprende tanto las clases de átomos de que se compone una sustancia como su estado mecanocuántico. "Reactividad" es un término genérico que se refiere a las transformaciones de las sustancias. Esto implica tanto las propiedades intrínsecas de una sustancia de transformarse en el tiempo como los modos en que se transforma cuando se la pone en contacto con otras sustancias.

Esta descripción del objeto de estudio de la química nos lleva a un criterio de individuación de las clases químicas. Para decidir si dos muestras de una sustancia son de la misma clase, un químico examina su estructura y reactividad en los tres niveles compositivos. Por ejemplo, los alcoholes metanol y etanol son clases químicas distintas en virtud de sus diferentes estructuras moleculares. Recurriendo a la descripción de Pauling, podemos dar un criterio simple de individuación química:

> Las clases químicas han de individuarse con respecto a estructura y reactividad a nivel molar, molecular y atómico.

En el presente capítulo recurriré a este criterio de individuación para determinar qué agrupaciones son legítimas clases químicas y cuáles no. Por ejemplo, todos los solventes de un laboratorio fabricados por la empresa química Aldrich no constituyen una clase química. Podrían ser una agrupación legítima si quisiéramos determinar cuánto dinero se debe a Aldrich; pero como no se individuaron por semejanzas de estructura o reactividad, no constituyen una clase química.

Cuando aplicamos los criterios de individuación al agua, queda claro que debemos investigar los tres niveles estructurales, así como la reactividad del agua, para obtener un cuadro completo del modo como el agua debe individuarse. En este trabajo me limitaré a discutir la estructura al nivel atómico, así como las propiedades de reactividad asociadas. Un tratamiento completo de lo que es exactamente el agua, sin embargo, requeriría muchos más detalles que los que daré en este capítulo sobre los niveles estructurales superiores.[3]

ISÓMEROS ISOTÓPICOS

Tanto el hidrógeno como el oxígeno se encuentran en la naturaleza en una diversidad de isótopos, lo que da lugar al fenómeno del isomerismo isotópico. Después de describir cómo se aplica este fenómeno al agua, discutiré las implicaciones del isomerismo isotópico para el principio de coordinación. Aunque la presentación de los temas científicos y filosóficos es de mi autoría, estoy en deuda con las intuiciones que he encontrado en las discusiones de Mellor (1974), Stroll (1998) y Needham (2000) de estos temas.

Los isótopos son conjuntos de átomos de igual número de protones y electrones, pero distinto número de neutrones. En la mayoría de los casos un átomo de hidrógeno tiene un protón y ningún neutrón. Los químicos por lo general se limitan a llamar a éste "hidrógeno" y simbolizarlo como "H". Cuando es necesario distinguir entre isótopos, los químicos lo llaman "hidrógeno 1" o lo simbolizan como "^{1}H". En 1931 Harold Urey descubrió un segundo isótopo del hidrógeno llamado "deuterio". El deuterio, simbolizado como "D", tiene un neutrón, un protón y un electrón. Investigaciones posteriores descubrieron también un tercer isótopo del hidrógeno llamado "tritio" (simbolizado "T"), que tiene dos neutrones, un protón y un electrón. Las muestras de hidrógeno que se encuentran en la naturaleza contienen una mezcla de hidrógeno 1 y deuterio. El tritio no se presenta naturalmente, pero puede encontrarse en muestras de hidrógeno por muchas razones; por ejemplo, habiéndose generado como producto de la desintegración de otros isótopos, por rayos cósmicos e incluso por lluvia radiactiva. El oxígeno también tiene tres isótopos: ^{16}O, ^{17}O y ^{18}O. Los tres son estables y tienen 8 protones y 8 electrones, pero 8, 9 y 10 neutrones, respectivamente.

Como los isótopos tienen un comportamiento químico y termodinámico muy parecido, las reacciones químicas naturalmente ocurrentes que producen moléculas como el agua no pueden, en la mayoría de los casos, distinguir entre los isótopos.[4] Debido a esto y a que todas las muestras de hidrógeno en la naturaleza contienen una mezcla de los isótopos, un análisis elemental del agua natural revelaría que hay cierta fracción de deuterio mezclada con el hidrógeno 1. Lo más probable sería que la proporción reprodujera la proporción natural o antecedente entre hidrógeno 1 y deuterio, que es de 99.985 a 0.015. De manera similar, muchas muestras de agua terrestre contienen cantidades mínimas de tritio debido a que éste se encuentra en proporción igualmente pequeña en la Tierra. Si examinamos suficientes muestras de agua en suficiente cantidad, encontraremos $H_2{}^{17}O$, $H_2{}^{18}O$, $HD^{16}O$, $D_2{}^{17}O$, $T_2{}^{18}O$, etc., además de $H_2{}^{16}O$. De hecho, las muestras naturales de agua casi siempre contienen una mezcla de estos otros isómeros. Para averiguar cómo individuar la clase agua, pues, tenemos que hacer varias preguntas: ¿Es el $H_2{}^{16}O$ puro una clase química? ¿Qué hay del $D_2{}^{16}O$? En muestras normales terrestres, que son mayormente $H_2{}^{16}O$, ¿qué margen de variación isotópica se admite? Si las sustancias descritas en todas las preguntas anteriores son clases químicas, ¿cómo decidimos cuál corresponde a la clase del lenguaje corriente agua?

El $H_2{}^{16}O$ puro es una clase química porque se puede individuar en cuanto a estructura a nivel tanto molecular como atómico. De igual manera, el $H_2{}^{17}O$ puro es una clase química, como lo es el $D_2{}^{16}O$ puro. Esto es un problema porque el principio de coordinación requiere que la química genere una sola clase que pueda asociarse con la clase del lenguaje común. Aunque lo anterior parece no ser más que una manifestación del *qua problem*, [5] argüiré que en realidad es síntoma de un problema más profundo. Antes de abordarlo, consideremos qué sucedería si eligiéramos sólo una de estas clases para coordinarla con nuestra clase del lenguaje corriente. Una manera de hacerlo con base en un principio es elegir el principal componente de las muestras del agua presente en la naturaleza. Siguiendo esta regla, elegiríamos la clase que constara total y exclusivamente de las moléculas de fórmula molecular $H_2{}^{16}O$.

Esta solución, sin embargo, es problemática porque *siempre* hay isómeros presentes en las muestras naturales. Uno de estos isómeros (el $HD^{16}O$) constituye alrededor de 0.03% del agua natural de la Tierra. Esto podría parecer insignificante, pero quiere decir que en un sorbo de agua (unos 18 ml) hay alrededor de 1.8×10^{22} moléculas de $HD^{16}O$, o sea, 18 000 trillones de moléculas de $HD^{16}O$ por sorbo. Por eso parece equivocado ignorar sin reserva las contribuciones de otros isótopos.

Quizá una manera de mantener la afirmación de que el agua debe identificarse con todas las moléculas de fórmula molecular $H_2{}^{16}O$ y sólo con ellas sea insistir en que los demás isómeros son impurezas. La propuesta parece en principio admisible, porque no tenemos inconveniente en considerar el agua de mar, el agua sucia, la lluvia ácida y demás como agua, al menos en el sentido de todos los días, aunque no sean homogéneas a nivel molecular.

Por atractiva que parezca esta posibilidad, creo que no podemos considerar los isómeros como impurezas. Para poder considerar alguna muestra de sustancia como impureza o contenedora de impurezas, tenemos que empezar por concebir un tipo de sustancia pura. Si isómeros como el $D_2{}^{16}O$ son impurezas, entonces esto indica que una muestra enteramente hecha de moléculas de $H_2{}^{16}O$ es la sustancia pura. ¿Hay buenas razones para concluir esto?

Creo que no las hay. De hecho, si la pureza significa algo así como “sin cambios ni adiciones”, entonces hay un sentido en el que las muestras isotópicamente *homogéneas* son impuras. Se han medido proporciones isotópicas normales de todos los isótopos estables y se han integrado en las masas elementales especificadas en la tabla periódica. Estos valores reflejan el resultado de un conjunto de procesos de fraccionamiento geológico, biológico, químico y nuclear que han ocurrido en el curso de la historia de nuestro planeta. La razón de que estos valores nos permitan hacer cálculos precisos es que todas las muestras naturales que hemos medido han sufrido los mismos procesos de fraccionamiento a lo largo de sus historias. Las desviaciones con respecto a esta distribución histórica de las abundancias debe explicarse en cuanto intervención de algún proceso *ulterior* de fraccionamiento biológico, químico o nuclear.

Si la noción de una sustancia pura ha de ser útil, no puede ser meramente una medida

de homogeneidad. Antes bien, nuestra noción de una sustancia pura debe tener en cuenta la variación isotópica natural. Esto es importante si queremos descubrir la extensión del término de clase natural del lenguaje común "agua". Una muestra homogénea de moléculas de $H_2{}^{16}O$ es una clase química, pero cuando intentamos encontrar una clase química próxima a la clase reconocida por los hablantes comunes, no veo justificación alguna para ignorar sin más las proporciones isotópicas normales.

Está claro que al individuar clases químicas no podemos ignorar los isómeros sin más. También hemos aprendido que no podemos afirmar sin más que los isómeros son impurezas. Una posibilidad más admisible es afirmar que "H_2O" es en realidad un término de orden superior, un género en el que se incluyen como especies constituyentes todos los isómeros del H_2O. Podríamos entonces mantener la afirmación de que el agua es H_2O, pero con un entendimiento un tanto distinto de lo que "H_2O" significa. Hay algo que parece correcto en esta propuesta, porque empezamos a ver cómo nuestros términos de clases del lenguaje corriente quizá no se correspondan a la perfección con las clases químicas. La solución del género y las especies, sin embargo, no dará resultado en este caso.

El principal problema de la solución del H_2O como género es que no hace mención de la abundancia relativa de las especies de isómeros, y tales diferencias pueden tener influencias grandes en las propiedades de las sustancias. Si tratamos el término "H_2O" como término de género y mantenemos la afirmación de que "el agua es H_2O", entonces tenemos que concluir que una muestra que consiste sólo en $D_2{}^{16}O$ es agua. No hay duda de que el $D_2{}^{16}O$ puro es una clase química. De hecho, generalmente recibe el nombre de "agua pesada" y se usa en algunos reactores nucleares. El $D_2{}^{16}O$ puro, sin embargo, difiere marcadamente del agua ordinaria. Aunque el $D_2{}^{16}O$ puede sufrir reacciones semejantes a las que sufre el $H_2{}^{16}O$, el ritmo de reacción difiere lo suficiente para hacer que la ingestión de $D_2{}^{16}O$ resulte letal. El D del $D_2{}^{16}O$ se intercambia con átomos de hidrógeno 1 presentes en nuestro cuerpo, perturbando procesos metabólicos críticos. Además, algunas de las propiedades estructurales molares, como el punto de congelación y la viscosidad, varían entre muestras que contienen distintas mezclas de isómeros isotópicos. El punto de congelación del $D_2{}^{16}O$, por ejemplo, es de unos 2 °C, en comparación con los 0 °C de una muestra de agua terrestre común. Esto también constituye una diferencia marcada según nuestros criterios de individuación. Sin embargo, nuestra proposición de tratar el término "H_2O" como término de orden superior, discerniendo todos sus isómeros, trata al $D_2{}^{16}O$ y al $H_2{}^{16}O$ puros como la misma clase de cosa, y aunque son especies de un género corriente, se distinguen claramente tanto en química como en contextos de todos los días.

Ni tratar los isómeros como impurezas ni tratar el término "H_2O" como término de orden superior discerniendo todos sus isómeros parece ser un modo aceptable de encontrar la clase química única exigida por el principio de coordinación. Está claro que el sistema de clases reconocido en química es muy complejo y multifacético, lo que está

en conflicto con la exigencia del principio de coordinación de la clase química única que ha de asociarse con la clase del lenguaje común agua. Quizá una mirada más atenta a cómo abordan los propios químicos el complejo sistema de clases ayude a resolver la tensión.

Los químicos abordan la multiplicidad de clases químicas de dos maneras. La mayoría de las veces la abordan usando términos de clases sensibles al contexto. Estos términos disciernen entre distintas clases químicas en diversos contextos explicativos y conversacionales. “Agua”, dicho por un químico, se refiere unas veces a los isómeros de H_2O en sus abundancias naturales, otras veces a cualquier isómero de H_2O, y otras más, quizá, a una muestra homogénea de $H_2{}^{16}O$, según las circunstancias en que lo dice.

Cuando deben ser explícitos, los químicos usan un conjunto de términos muy específicos que corresponden a clases químicas muy específicas. Los efectos de que los químicos deban ser explícitos pueden encontrarse en la nomenclatura extremadamente precisa y a menudo muy compleja establecida por la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC, por sus siglas en inglés). En esta nomenclatura, aun las distintas fases del agua, concepto que no he discutido, reciben denominaciones propias como agua (I), agua (VI), etc. La inmensa mayoría de los químicos y la literatura química, sin embargo, se refieren a las sustancias de manera más directa, usando términos como “agua” o “etanol” o “tetrahidrofurano”, que resultan claros por el contexto.

La discusión del isomerismo isotópico no es más que una fuente de complejidad química que plantea problemas al principio de coordinación. Surgen muchos otros factores y complicaciones fascinantes cuando consideramos las propiedades macroscópicas del agua.[6] Éstas revisten importancia especial porque los químicos suelen concebir el agua como una sustancia macroscópica con propiedades macroscópicas, no sólo como un cúmulo de moléculas de agua. Aunque sería fascinante explorar más estas complejidades, creo que ya tenemos suficiente información para reexaminar el principio de coordinación.

Nuestro muy breve examen de la naturaleza del agua ha revelado que no hay una sola clase que la comprenda y que sea útil en todos los contextos químicos. Hemos visto, en particular, que el conjunto de sustancias de fórmula molecular H_2O no suele ser una clase química muy útil. No sirve para hacer distinciones entre sustancias que tanto los químicos como los usuarios del lenguaje corriente quisieran hacer. Aunque el principio de coordinación sea aceptable sin revisión, deberíamos elegir una clase que tenga en cuenta las distribuciones isotópicas normales. Sin embargo, soy escéptico en cuanto a que ésta sea una solución adecuada, porque los problemas del principio de coordinación son más profundos de lo que esta solución atiende.

Dos resultados de nuestra investigación ejercen presión sobre el principio de coordinación en su forma vigente. El primer resultado es que la química no puede limitarse a entregarnos una sola clase con la cual podamos asociar la clase del lenguaje común agua, porque en química hay un sistema de clases más complejo. El segundo resultado es que los químicos suelen abordar estas cuestiones usando términos de clases de modos sensibles al contexto. Creo que cada uno de ellos contiene una clave para perfeccionar el principio de coordinación.

El primer resultado indica que quizá no sea posible la correlación uno a uno, requerida por el principio de coordinación, entre términos de clases en el lenguaje corriente y términos de clases en las ciencias naturales. A diferencia de algunos críticos, yo no he argüido que el lenguaje corriente y las ciencias naturales usen términos de distintas extensiones. Un externalista puede soslayar esta clase de crítica defendiendo una actitud de deferencia hacia los expertos, ignorando nuestra concepción popular de las extensiones de los términos de clases naturales. Mi argumento es que aun si somos deferentes con los expertos sobre casos como el del agua, ellos no pueden darnos una *única* clase natural que asociar con la clase usada en contextos cotidianos por los usuarios del lenguaje común. El sistema de clases reconocido en química es mucho más complejo que el sistema de clases reconocido por los usuarios del lenguaje natural. Hay muchos tipos más de clases en química, útiles para distintos propósitos teóricos.

El segundo resultado indica un modo en que un filósofo externalista del lenguaje podría refinar el principio de coordinación a fin de tener en cuenta el primer resultado. El uso corriente de los químicos de los términos de clases naturales es muy sensible al contexto. Cuando tienen que ser más precisos para hacer distinciones finas entre fenómenos sutilmente diferentes, emplean un conjunto más nutrido de términos de clases

que corresponden más estrechamente a la multiplicidad de clases reconocidas en química. En muchos casos, sin embargo, bastan los términos sensibles al contexto. Supongamos que un químico tiene que usar un baño de agua caliente para mantener una reacción a una temperatura determinada. Su solicitud de más agua caliente a un colaborador se entenderá como que quiere una sustancia compuesta principalmente de moléculas de H_2O de una abundancia isotópica que oscile en el intervalo de valores antecedentes normales. Si, en cambio, está haciendo un estudio cinético muy sensible isotópicamente, su petición de agua se interpretará de distinta manera, quizá una que requiera distinciones ulteriores.

Estas consideraciones indican que el principio de coordinación debería incluir un mecanismo para discernir la clase química correcta que ha de coordinarse con las clases del lenguaje común en distintos contextos. Al igual que la propia química, y quizá más, el lenguaje corriente admite un gran margen de tolerancia para cosas como las distribuciones isotópicas en muchos contextos. Regar el césped, llenar una piscina e incluso darse un baño no imponen requisitos muy enérgicos a cosas como las proporciones isotópicas. Sin embargo, en algunos casos, como cuando queremos preparar fármacos, proteger un ecosistema o incluso tomar una bebida, nuestra tolerancia de la variación es limitada. En contextos donde una variación extrema es aceptable, el principio de coordinación puede relajarse bastante, asociando el término de clase de un enunciado con un conjunto de clases químicas o con una clase de género de nivel superior. En contextos donde tal variación no es aceptable, el principio de coordinación debe tener un mecanismo para discernir la clase química más apropiada para el contexto de que se trate.

Aunque un externalista podría limitarse a elegir alguna clase química para coordinarla con la clase del lenguaje común en todos los contextos, ignorando la complejidad del sistema de clases químicas, esta estrategia me parece miope. Como la estrategia del externalista que he venido discutiendo implica una actitud deferente hacia las ciencias naturales, creo que nuestra mirada más atenta a los tipos de clases reconocidos en efecto en química es pertinente. La complejidad de las sustancias materiales exige a los químicos, que son quienes interaccionan con ellas al mayor grado de detalle, usar un conjunto de términos de clases multifacético y a menudo sensible al contexto. Haríamos bien en reproducir esta práctica en nuestras discusiones sobre el lenguaje corriente.

CONCLUSIONES

He analizado en este trabajo un presupuesto de las teorías externalistas semánticas que he llamado principio de coordinación. Se trata de la idea de que las clases del lenguaje común y las clases científicas se alinean o se pueden correlacionar entre sí una a una. Una mirada más atenta al agua muestra que no existe este tipo de correspondencia elemento por elemento entre clases químicas y del lenguaje corriente. De hecho, el uso de términos de clases en química suele ser sensible al contexto, y en casos en que los químicos quieren evitar toda ambigüedad, usan un conjunto muy complejo y matizado de términos de clases, ninguno de los cuales podría asociarse razonablemente con el solo término de clase del lenguaje común "agua". Como no podemos limitarnos a acudir a la química para encontrar una clase química *única* que pueda usarse para determinar la extensión de "agua", no hay ningún sentido estricto en el que el agua sea H_2O, porque aquello que el agua es exactamente depende del contexto en que se dice "agua".

Agradecimientos

Muchas gracias a Peter Godfrey-Smith, Michael Strevens, Anthony Everett y Deena Skolnick, que me ayudaron tremendamente a aclarar las principales ideas de este trabajo. También quisiera agradecer a Philip Kitcher, Sandra Mitchell, Paul Churchland, Roald Hoffmann, John Brauman, Paul Needham, Tania Lombrozo y Daniel Corbett sus útiles discusiones de anteriores borradores. La labor de este trabajo fue patrocinada en parte por una beca de investigación de posgrado de la Fundación Nacional de Ciencia de los Estados Unidos.

BIBLIOGRAFÍA

Devitt, M., y K. Sterelny, *Language and Reality*, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1999.

Dupré, J., *The Disorder of Things*, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1993.

Johnson, M., "Manifest Kinds", *Journal of Philosophy*, vol. 94, núm. 11, 1997, pp. 564-583.

Kripke, S., *Naming and Necessity*, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1980.

Mellor, D. N., "Natural Kinds", *The British Journal for the Philosophy of Science*, vol. 28, núm. 4, 1974, pp. 299-312.

Needham, P., "What is Water?", *Analysis*, vol. 60, núm. 1, 2000, pp. 13-21.

Pauling, L., *General Chemistry*, W. H. Freeman, San Francisco, 1947.

Putnam, H., "The Meaning of 'Meaning' ", en H. Putnam, *Collected Papers*, vol. 2: *Mind, Language, and Reality*, Cambridge University Press, Cambridge, 1975.

Sterelny, K., "Natural Kind Terms", *Pacific Philosophical Quarterly*, vol. 64, núm. 1, 1983, pp. 110-125.

Stroll, A., *Sketches of Landscapes: Philosophy by Example*, MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1998.

---

[*] Universidad de Pensilvania.

[1] Hay, desde luego, gran variación entre los externalistas semánticos. En este trabajo discutiré principalmente las opiniones de Putnam (1975) y Kripke (1980).

[2] Un filósofo que ha apreciado los problemas de esta opinión, en relación con las clases biológicas, es John Dupré (1993).

[3] Muchas discusiones de clases naturales en la literatura filosófica tratan lo macroscópico como esfera del sentido común y lo microscópico como esfera de la ciencia. Johnson (1997), por ejemplo, hace esta afirmación en su distinción entre clases químicas y clases manifiestas. Aunque no diré mucho sobre los tratamientos químicos de las propiedades macroscópicas del agua, éstas son muy importantes. Si bien es posible que exista algo así como una clase manifiesta, es importante ver que las clases químicas también se pueden individuar a escala macroscópica en virtud de las estructuras de ensamblaje de las sustancias.

[4] Una manera más formal de expresar lo anterior es decir que el comportamiento químico de los dos isómeros isotópicos es el mismo ante una primera aproximación. En términos generales, esto se debe a que el comportamiento químico de los diferentes isótopos es proporcional a $\sqrt{m}$, donde m es la masa reducida de la molécula. Esto se ejemplifica en la velocidad molecular, las frecuencias vibracionales de los espectros infrarrojos y otras propiedades químicamente importantes de las moléculas. Las diferencias isotópicas por lo general cambian la masa reducida sólo ligeramente. Los distintos isótopos del hidrógeno, sin embargo, son considerablemente diferentes en masa, lo suficiente para originar considerables variaciones químicas entre los isómeros.

[5] El *qua problem* tiene que ver con la multiplicidad de clases asociadas con un objeto particular. Sterelny imagina que, en una expedición a Marte, avista un animal parecido a un gato y lo llama *schmat*. Escribe: "El *schmat* será miembro de muchas clases. Una lista no exhaustiva comprendería: objeto físico, objeto animado, objeto animado con ciertas propiedades estructurales […]" (Sterelny, 1983, p. 120). El problema es cómo determinar qué clase fue bautizada como *schmat* en el viaje de Sterelny a Marte. Los externalistas semánticos que escriben en la actualidad son sensibles a este asunto y se toman en serio la necesidad de abordar el problema. Véase, por ejemplo, Devitt y Sterelny, 1999, p. 90.

[6] Véase, en Needham (2000), una discusión minuciosa de estas cuestiones.

XIX. DE LA METAFÍSICA A LA METAQUÍMICA[1]

ALFRED NORDMANN*

En 1940 apareció *La philosophie du non [La filosofía del no]* de Gaston Bachelard. La edición estadunidense de 1968 traduce de manera bastante obvia el título como *The Philosophy of No*, y 10 años después siguió la edición alemana, *Die Philosophie des Nein*. Sin embargo, *Die Philosophie des Nicht* habría sido más apropiado, y en inglés —por imposible que parezca—, *Philosophy of Non*. Después de todo, siguiendo el ejemplo de la geometría no euclidiana, Bachelard se complace en el *non* ["no"] de la lógica no aristotélica, la epistemología no cartesiana, la ciencia no baconiana, la ontología no kantiana, la mecánica no newtoniana y la química no lavoisiana. En todos estos casos el *non* indica, no una negación o antítesis, sino que más bien marca la geometría euclidiana como caso especial de geometría no euclidiana diferenciada, la química lavoisiana como conjunto limitado de prácticas que se refleja dialécticamente en la química no lavoisiana, etc. (Bachelard, 1968, pp. 55, 115).

Según Bachelard, los nuevos procedimientos y prácticas experimentales de las ciencias introducen nuevas maneras de identificar, colocar, inferir o estabilizar acontecimientos. Así, las ciencias van añadiendo con el tiempo nuevas capas de conceptualización para que las propiedades "arraiguen" (Bachelard, 1968, p. 45), y nuevas líneas espectrales al "perfil epistemológico" de nociones como "masa", "energía" o "sustancia". Bachelard, por tanto, no introduce su filosofía del "no" como teoría general de la ciencia, sino como intento de captar y articular la importancia de una nueva ciencia emergente que a su paso crea también una nueva filosofía (*cf*. Bachelard, 1984, p. 3): el "no" de Bachelard ofrece "cierto presentimiento de una profunda revolución en la filosofía química". Anunciando esta inminente revolución, Bachelard continúa: "la metaquímica parecería ya ser una posibilidad".[2] Y: "La metaquímica sería a la metafísica lo que la química a la física" (Bachelard, 1968, p. 45). Este trabajo explora la promesa de Bachelard de una metaquímica. En el camino reúne una serie de claves que indican que, en el ínterin, la metaquímica se ha articulado o realizado más cabalmente en la obra de Bruno Latour.[3] Su *Pandora's Hope* (Latour, 1999), por ejemplo, es un tratado de metaquímica, aunque el autor no usa este término. Sin embargo, mientras que Bachelard intenta determinar la relación entre metafísica y metaquímica en una nueva era científica, Latour ofrece la metaquímica como medio para disipar pseudoproblemas metafísicos de la ciencia en general. Esta diferencia hace necesaria una exploración de contextos intelectuales. Empezando por el desafío planteado por el químico convertido en filósofo Émile Meyerson, esta exploración podría continuar con la respuesta a ese desafío del algún tiempo químico Gaston Bachelard,[4] y entonces concluir quizá con la herencia de Bruno Latour de la problemática de Meyerson y Bachelard, aunque él rechace el racionalismo de ambos.[5] Sin embargo, lejos de reconstruir contextos y trayectorias de influencia, los siguientes comentarios intentan principalmente trasponer las peculiaridades del estilo de Bachelard —el exceso de neologismos en particular— y aclarar su contraste entre metafísica y metaquímica:

> La metafísica no podía tener más que una noción posible de sustancia porque la concepción elemental de los fenómenos físicos se conformaba con estudiar un sólido geométrico caracterizado por propiedades generales. La metaquímica se beneficiará del conocimiento químico de diversas actividades sustanciales. También se beneficiará del hecho de que las verdaderas sustancias químicas son productos de la técnica y no cuerpos que se encuentran en la realidad. Esto equivale a mostrar que lo real en química es una realización [1968, p. 45].

La proposición de Bachelard se puede analizar resaltando las varias etapas de este movimiento desde diferentes concepciones de "sustancia" hasta la "realización" física, social, así como consciente, "de lo real". Implícita y explícitamente, la metafísica y la metaquímica de la ciencia estarán yuxtapuestas de principio a fin.

La metafísica, propone Bachelard, opera con una noción empobrecida, insustancial de sustancia que heredó —como la física clásica— de la concepción griega de la ciencia y su interés en lo que persiste a través del cambio.[6] "La metafísica no podía tener más que una noción posible de sustancia porque la concepción elemental de los fenómenos físicos se conformaba con estudiar un sólido geométrico caracterizado por propiedades generales" (Bachelard, 1968, p. 45).

Las propiedades generales de los elementos son las propiedades de la materia, considerada o bien como extensión e impenetrabilidad, o bien en relación con la fuerza o la energía. Se piensa que todo está compuesto de las disposiciones y redisposiciones espacio-temporales de estos elementos. Esta noción de sustancia está del todo indiferenciada; no distingue nada en particular, pero describe todo lo material. Al mismo tiempo, se la hipotetiza generosamente como sustrato impregnante de la realidad. Según la física y la metafísica, para todo lo que ocurre y para muchas cosas más que podrían ocurrir, hay propiedades generales latentes, inmutablemente sujetas a leyes, en espera de ser activadas y de manifestarse. La naturaleza ha llegado así a estar sobrepoblada de innumerables poderes durmientes que son semánticamente significativos y aun así físicamente irrelevantes.[7] Las variadas críticas de la metafísica, por tanto, se dirigían al carácter hipotético de la sustancia (aunque rara vez a su multiplicación más allá de lo necesario), pero seguían manteniendo que todo lo que podía significarse con el término "sustancia" es un constituyente persistente de la realidad.[8] Así, aunque algunos críticos afirmaban ahora que la razón o la subjetividad es la sustancia del mundo, y aunque otros tomaban la categoría "sustancia" en un sentido kantiano como condición previa a la posibilidad de conocimiento científico, el término siguió refiriéndose a algo autosuficiente e indiferenciado: el componente del mundo que persiste a través del cambio; un vehículo inmutable de propiedades accidentales, nunca cognoscible de manera directa ni perceptiva. Como la sustancia está siempre, quizá necesariamente, *hipotetizada*, se acompaña de la pregunta metafísica sobre su existencia durante todo el camino hasta la disputa contemporánea entre los "gemelos exasperantes": el realismo (u objetivismo) y el relativismo (Feyerabend, 1991, p. 515).[9]

Filósofos como F. W. Schelling, Charles Sanders Peirce, Émile Meyerson y Alfred North Whitehead cuestionaron esta concepción *física* de la sustancia.[10] Con Bachelard, podríamos decir que las preguntas críticas que ellos plantean introducen en la filosofía una concepción *química* de la sustancia. Para el químico, el término "sustancia" designa ante todo el cuerpo elemental o compuesto específico que está presente al principio y al final de un proceso químico (*cf*. Bachelard, 1968, pp. 45, 49, 60, 70). Una sustancia química en cuanto tal no es un sustrato hipotético, sino que se presenta en la práctica química. Las preguntas sobre su realidad no se refieren a su existencia, sino a cómo se da a conocer. Dado que la sustancia química se presenta a distintos niveles de experiencia en el laboratorio, Bachelard postula para ella una "realidad laminar"; "la sustancia no tiene la misma coherencia a todos los niveles" (Bachelard, 1968, p. 46): "En

los primeros días de la química orgánica, a la gente le gustaba creer que la síntesis no servía más que para verificar la exactitud de un análisis. Hoy ocurre prácticamente lo contrario. No se llega a definir en verdad a las sustancias químicas hasta el momento de su reconstrucción" (Bachelard, 1968, p. 47).

En la medida en que la síntesis era estrictamente un análogo del análisis, la química siguió prestando una atención limitada al sustrato elemental de determinados compuestos. A este nivel, las sustancias todavía están individualizadas de tal manera que cada elemento químico podría tener su propia sustancia (Stengers, 1994; Bensaude-Vincent, 1994). La coherencia de la sustancia aumentó, sin embargo, cuando la síntesis alcanzó la plenitud. Las múltiples técnicas de realización establecieron nuevas relaciones químicas, propusieron agrupamientos funcionales, permitieron que combinaciones producidas en el laboratorio iluminaran las combinaciones que se encuentran en la naturaleza.[11] En la medida en que esta noción química de sustancia no se generalizó sino a través del desarrollo de técnicas químicas convergentes, el éxito del químico está en conflicto con la conceptualización del filósofo (metafísico): "Pese a una realidad que se ha construido con tanta seguridad, dejemos que los filósofos equiparen, si quieren, la sustancia con lo que escapa a la cognición en el proceso de construcción; que sigan definiendo la realidad, si quieren, como una masa de irracionalidad.[12] Para un químico que acaba de realizar una síntesis, la sustancia química debe equipararse, por el contrario, con lo que sabemos de ella […]" (Bachelard, 1968, p. 47).

Esta oposición también está presente, por ejemplo, en la crítica de Whitehead de la noción metafísica de sustrato, crítica que emplea metáforas químicas y se refiere en último término a la química. Según Whitehead, cuando postulamos que nuestras percepciones sensoriales no son más que atributos de una sustancia, esto es, efectos en nuestra mente de una realidad subyacente que ya está dada, "se ha introducido en la naturaleza una distinción que no es en verdad distinción alguna […]: lo que es un mero procedimiento de la mente en la traducción de la conciencia sensorial al conocimiento discursivo se ha transmutado en un carácter fundamental de la naturaleza. Así ha emergido la materia como sustrato metafísico de sus propiedades […]" (Whitehead, 1920, p. 16).[13] Según la descripción de Whitehead, la "sustancia" o "sustrato" de la metafísica clásica es resultado de un proceso de traducción y transmutación, un procedimiento de la mente que debe reconocerse como tal. "Si hemos de buscar la sustancia en algún lugar", concluye, "hay que encontrarla en acontecimientos que son en algún sentido la sustancia última de la naturaleza" (Whitehead, 1920, p. 19). Un ejemplo de la química ayuda a definir lo que es un "acontecimiento": es un "nexo de ocasiones reales […] Por ejemplo, una molécula es un camino histórico de ocasiones reales, y tal camino es un 'acontecimiento' " (Whitehead, 1978, p. 80).[14]

A través de un camino histórico algo sinuoso muy propio, los comentarios de Whitehead dejarían una huella en *La philosophie du non* de Bachelard.[15] Bruno Latour se refiere a ellos de manera más explícita. Él también pasa de "sustancia" con todo su bagaje metafísico a "acontecimiento" o "institución". Aunque este cambio se aplica a toda la ciencia, se origina en la discusión de Latour de la obra de un químico:[16]

> Lo que Pasteur dejó en claro [….] es que poco a poco vamos pasando de una serie de atributos a una sustancia. El fermento comenzó como atributos y *terminó siendo una sustancia*, una cosa con límites claros, con nombre, con obstinación, que era más que la suma de sus partes. La palabra "sustancia" no designa lo que "queda debajo", indiferente a la historia, sino lo que reúne una multiplicidad de agentes en un todo estable y coherente. Una sustancia es más como el hilo que enlaza las perlas de un collar que como el lecho de roca que sigue siendo el mismo sin importar lo que se construya sobre él […] sustancia es un nombre que designa la *estabilidad* de un conjunto [1999, p. 151, *cf*. pp. 167 y 170].[17]

Así anticipó Whitehead, y Latour sostiene, el comentario de Bachelard antes citado "de que las verdaderas sustancias químicas son productos de la técnica y no cuerpos que se encuentran en la realidad" (Bachelard, 1968, p. 45). Ahora bien, si acontecimientos, reconstrucciones sintéticas y realizaciones técnicas son en cierto sentido la sustancia última de la naturaleza, ¿qué pasó con la observación original de que la sustancia química es ante todo el cuerpo elemental o compuesto específico que está presente al principio y al final de un proceso químico? Según Bachelard, la ciencia agrega a la identificación "ingenuamente" realista de sustancia (donde "sustancia" está simplemente predicada) otra capa "racionalizada" de significado (que considera que "sustancia" es una categoría del entendimiento). Aunque estas dos capas de significado coexisten en cada mente y aunque para cada capa sustancia es lo que se sabe de ella, las dos capas juntas no dan una única noción coherente de "sustancia". Es así como la concepción de realidad laminar o estratificada de Bachelard por fin llega a la tercera capa de "no sustancialismo": igual que una molécula, así la noción misma de "sustancia" recorre un camino histórico de ocasiones reales. Y como el propio camino es el acontecimiento, y el acontecimiento es en algún sentido la sustancia última de la naturaleza, Bachelard encuentra que la sustancia última de "sustancia" se ha disuelto en su propia historia de racionalizaciones y conceptualizaciones (1968, pp. 44, 72 y s., 76).[18]

Bachelard extrapola su construcción no sólo de la historia de la filosofía, sino, más significativamente, de la de la química. Según Bachelard y antes que él Meyerson, el mismo desarrollo de la química ofrece una historia filosófica de "sustancia". Como Meyerson, Bachelard creía que sólo con Lavoisier "[l]a mente científica ha […] suplantado por completo a la mente precientífica" (Bachelard, 1968, pp. 47 y s.). Según Meyerson, "la ciencia en su totalidad" tiene lugar en el intervalo entre, por una parte, la realidad cotidiana sensible, percibida, que la ciencia destruye y, por la otra, la última "desaparición de la materia (o la disolución de la sustancia) en el éter" que concluye el proyecto de la ciencia (Meyerson, 1991, p. 407). Aunque "las afirmaciones de los teóricos del flogisto también se basaban en la observación" (Meyerson, 1991, p. 207), no empleaban consecuentemente el principio de conservación, no usaban ese principio para destruir la realidad sensible, no "empobrecían la realidad para crear una ciencia legalista" (Meyerson, 1991, p. 407) y, por consiguiente, hablaban del cambio químico en términos cualitativos como si las propiedades pasaran de un cuerpo a otro (Meyerson, 1991, pp. 206 y s.). Lavoisier empleó un principio de conservación para instituir una ciencia legalista que luego generara una "ciencia teórica al despojar cuanto sea posible a la realidad de cualquier elemento cualitativo" (Meyerson, 1991, p. 407), sustituyendo el movimiento de entidades invisibles con el paso de propiedades sensibles (Meyerson, 1991, pp. 206 y s., *cf.* pp. 62 y ss.).[19] "En cierto sentido", añade Meyerson, los seres cuantitativos de la ciencia teórica son "aún más sustanciales" que "las cosas que creemos percibir": "Se da por sentado que son sustancias reales, y la ciencia, al quitarles su aspecto cualitativo […], aumentó su perdurabilidad" (Meyerson, 1991, p. 407). Así, nos parece que la forma esencial de nuestra ciencia está conformada sobre todo por el interés en explicar lo que cambia por lo que persiste (Meyerson, 1991, p. 130, *cf.* p. 119).

Según la interpretación de Meyerson, pues, Lavoisier dio un importante paso hacia el cumplimiento o realización del programa griego de filosofía y ciencia: disuelve el tiempo en el espacio y muestra que el cambio cualitativo no es real, mientras que los elementos invisibles subyacentes son tanto más reales cuanto que persisten a través de meros desplazamientos o cambios de posición.[20] Meyerson interpreta así el cambio de Lavoisier de una concepción de la sustancia a otra como lo que instituye precisamente la concepción idealizada de la ciencia que Meyerson abraza. Aunque él está explícitamente comprometido con una concepción metafísica de la ciencia, su descripción histórica produce una aseveración implícitamente metaquímica. Indiferente al problema de la existencia y el fundamento último de la realidad, la metaquímica se ocupa de los procesos por los que la realidad se transforma. Según Meyerson, la ciencia lavoisiana está guiada por un ideal físico, y en consecuencia transforma la realidad disolviendo la materia en el éter, el tiempo en el espacio, lo que se percibe en lo que se infiere y, desde luego, la sustancia química en la sustancia física. La metaquímica implícita de Meyerson alcanzó su plenitud cuando el mayor desarrollo de la química reveló que el ideal "lavoisiano" es sólo eso: una de varias posturas metaquímicas, convincente pero limitada. Según

Bachelard, estas limitaciones se hicieron evidentes y una metaquímica explícita se volvió posibilidad una vez que ciertas tensiones internas de la concepción lavoisiana de la ciencia y la sustancia empezaron a ser productivas y sirvieron para diferenciar el sustancialismo lavoisiano, o —en terminología de Bachelard— una vez que lo "dialectizaron".[21]

Como ocurre con todos los movimientos dialécticos, el desarrollo de posturas metaquímicas alternativas o diferenciadas y de la ciencia no lavoisiana acentúa ambigüedades que ya estaban presentes en la concepción de Meyerson de la ciencia, así como en la concepción de Lavoisier de la sustancia química.[22] Por una parte, como lo describe Meyerson, Lavoisier fisicaliza la sustancia química al dictaminar que "en todas las operaciones del arte y la naturaleza, nada se crea". Por otra parte, como señala Bachelard, la práctica científica de Lavoisier y su definición de "elemento" establecen que las sustancias se realizan como productos de la técnica.[23]

> Hay que multiplicar las realizaciones. Se tiene más probabilidad de conocer el azúcar haciendo azúcares que analizando un azúcar en particular. En este plan de realizaciones no se busca una generalización de cualquier modo; se busca una *sistematización*, un *plan*. La mente científica, *pues*, ha suplantado por completo a la mente precientífica. A *nuestro* modo de ver, entonces (en oposición al de Meyerson), *éste* es un realismo inverso […] *Él* es el fundamento del racionalismo químico [1968, pp. 47 y s.; las cursivas son mías].

El comentario de Bachelard articula tensiones dentro de la ciencia lavoisiana: el trabajo creativo de los científicos en el laboratorio de Lavoisier debía establecer que nada se crea y todo simplemente se descubre. La naturaleza del "azúcar" surge de la elaboración de "azúcares", y la sustancia en singular aparece, no como una apariencia en medio de la pluralidad de miembros, sino como una coordinación de prácticas. La presunta naturaleza informa la investigación sólo como categoría de experiencia posible para la representación de "azúcar". En vez de generalizar a partir de la experiencia de una realidad inmutable, el proceso sistemático de investigación y los planes de la ciencia forjan una realidad inmutable. Esto es "realismo inverso" en el sentido de que la realidad aparece, no como causa de la percepción, sino como producto de la investigación.[24] Y mientras que Meyerson celebra el producto que la ciencia de Lavoisier persigue, Bachelard insiste en su procedimiento. Según Bachelard, es esta tensión entre la representación que se persigue y su elaboración lo que da lugar (en el sustancialismo racionalizado de la ciencia lavoisiana) al no sustancialismo de una ciencia no lavoisiana que refleja esta tensión en su práctica.

Bachelard alude apenas a esta práctica no lavoisiana, y estas alusiones pueden hilvanarse, a lo sumo, de manera tentativa.[25] La más prominente de ellas asesta un duro golpe a la esencia de la ciencia lavoisiana y su confianza en los principios de conservación: "Así como hay geometrías que no obedecen al grupo de desplazamiento, que están organizadas en torno a otras invariantes, ha de preverse que haya químicas que no obedecen a la conservación de la materia[26] y que podrían, por tanto, estar organizadas en torno a alguna invariante distinta de la de masa" (Bachelard, 1968, p. 54). Bachelard dice poco sobre lo que podrían ser estas invariantes, si una de ellas sustituirá a la "masa" o si la ciencia no lavoisiana varía las invariantes para ganar un acceso multiperspectivo, adecuadamente disperso, a las capas de realidad. Esta última posibilidad puede estar implícita en su proposición de una alternativa al ideal lavoisiano de Meyerson:

> […] se creía que las condiciones estructurales lo decidían todo, y la idea era sin duda que se domina el tiempo cuando se está bien organizado en el espacio, con la consecuencia de que todos los aspectos temporales de los fenómenos químicos quedaron desatendidos. No se apreciaba en absoluto el hecho de que el tiempo mismo está estructurado; no se hacía ningún esfuerzo por estudiar los ritmos, desarrollos, operaciones, transformaciones: en estos campos, por tanto, hay nuevos conocimientos que ganar [Bachelard, 1968, p. 72].

Según el nivel de organización o intervención experimental al que se estudien estas transformaciones, los nuevos conocimientos que han de ganarse diferenciarán la noción de sustancia. Bachelard propone que en la sustancia metaquímica convergen tres nociones distintas, una de las cuales es la concepción metafísica tradicional de "substancia". Está complementada por la "sur-stancia" y la "ex-stancia" (Bachelard 1968, p. 66). "Sub-stancia" se refiere a lo que está detrás, debajo o delante del fenómeno observado; "sur-stancia" designa lo que emerge en el proceso de realización, es decir, lo que Latour llama una institución que coordina las prácticas humanas y no humanas. [27] "Ex-stancia", por último, se refiere al exceso de significado que una sola noción coherente de sustancia no absorbe y que Latour tiende a pasar por alto.[28]

La metaquímica *"dispersaría"* así "el sustancialismo", donde la metáfora de la dispersión se toma prestada del análisis espectrográfico (Bachelard, 1968, p. 45). Extendiendo esta analogía espectroscópica, Bachelard representa la diferenciación de "sustancia" por medio de un "psicoanálisis" químico y nada freudiano. La dispersión espectrográfica del sustancialismo produce líneas espectrales de "sustancia" donde el conjunto de las líneas proporciona el psicoanálisis de la construcción mental de ese concepto. Lo que Bachelard llama perfil epistemológico de "sustancia" es al mismo tiempo una representación de su realidad laminar, es decir, las sucesivas capas del realismo ingenuo y su uso predicativo de "sustancia"; del racionalismo o kantismo, en el que la sustancia es una categoría; de su "dinamización" en relación con la sub-stancia, la sur-stancia, la ex-stancia. El perfil resultante se parecería al que él produjo de su noción personal de "masa" (figura XIX.1). Dado que la "[f]otoquímica, con el espectroscopio,

parece ser una química no lavoisiana" (Bachelard, 1968, p. 58), Bachelard recurre aquí, de un modo que es ejemplo de lo mismo que expone, a una técnica no lavoisiana para proponer su argumento en favor de una metaquímica no lavoisiana.



FIGURA XIX.1. *"Psicoanálisis" espectroscópico de Bachelard de "masa" (Bachelard, 1968, p. 36*).

A diferencia de la metafísica, la metaquímica no intenta decidir entre el realismo ingenuo y los diversos matices del racionalismo; en cambio, produce análisis de dispersión de nociones como sustancia o masa, fuego o aire, en varias etapas de su camino hacia la realización de lo real. Es este camino y el desarrollo de proposiciones en el tiempo lo que finalmente tiene que esclarecerse.

"¿[D]ónde encontraremos los hechos que prefiguran, como hemos llegado a creer, el aspecto no lavoisiano de la química generalizada?", pregunta Bachelard, y de inmediato da una respuesta: "Han de encontrarse en la *dinamización* de la sustancia química" (Bachelard, 1968, p. 55). Empieza entonces a elaborar este carácter dinámico y temporal, si no histórico, de la sustancia química:

> [L]a reacción debe representarse en adelante como descriptiva de un proceso, como formadora de diversos estados sustanciales, o de una película cinematográfica de las sustancias [...] De inmediato un *llegar a ser* se define a sí mismo debajo del ser. Ahora bien, este llegar a ser no es ni unitario ni continuo. Se presenta como una especie de diálogo entre la materia y la energía [...] La energía es tan *real* como la sustancia y la sustancia *no es más real* que la energía. Por medio de la energía el tiempo deja su huella en la sustancia. No se puede mantener la anterior concepción de sustancia, por definición, fuera del tiempo [Bachelard, 1968, pp. 56 y s.].

La anterior concepción de sustancia representaba a ésta como entidad hipotética precisamente porque la postulaba como lo que persiste a través del tiempo. Aun entre quienes coincidían en que el mundo es inteligible a la mente humana sólo si se presupone la persistencia de características sustanciales, el golfo entre realistas y antirrealistas se ensanchó: junto con Whitehead, Locke y la mayoría de los kantianos, los antirrealistas sospechan que los realistas transmutan un postulado de la mente en un carácter fundamental de la naturaleza (véase la discusión de Whitehead en la sección "La sustancia de 'sustancia' "). Sin embargo, en cuanto se concede que "el tiempo deja su huella en la sustancia", cesa el carácter hipotético de la persistencia, y el viejo debate de los realistas contra los antirrealistas se vuelve obsoleto. Lo remplaza la pregunta de cómo se instituye la sustancia y cómo llega a realizarse su realidad de manera física, social, consciente, a través del tiempo.

Whitehead refería la institución de "sustancia" al nexo de ocasiones u operaciones reales, esto es, a un acontecimiento intrínsecamente histórico. Bachelard sigue adelante en la búsqueda de la "dinamización de la sustancia" y considera su historia como una *serie* de acontecimientos adoptando la metáfora de Paul Renaud de una "trayectoria química" (Bachelard, 1968, p. 61) que puede representarse como una recta o una curva continua: "Es muy natural decir [...] que una sustancia que se está purificando *pasa por* estados sucesivos, y de esto a suponer que la purificación es *continua* no hay gran diferencia. Si se duda en postular esta continuidad, al menos no es difícil de aceptar [...] que la purificación puede *representarse* con una línea continua" (Bachelard, 1968, p. 61). Esta línea continua representa la "incorporación, en la definición de sustancias, de

las condiciones necesarias para detectarlas" (Bachelard, 1968, p. 59). En otras palabras, "cuando una de las variables incluidas en la representación es el *tiempo* y la otra variable corresponde a alguna característica de sustancia", se hace visible una trayectoria química (Bachelard, 1968, p. 64).

Lo que Bachelard propone aquí es que se podría representar en una gráfica la definición o la institución de la sustancia. La gráfica representaría un camino o conducto de purificación. La elección de variables impide el presupuesto metafísico de que hay "algo" estable que se está sometiendo a purificación. La constancia aparente de este "algo" no emerge sino de la persistencia efectivamente observada de las características a través del tiempo, esto es, de la continuidad tentativa de la línea. En este sentido, la "representación" que la gráfica proporciona no es una representación *de* la realidad, sino que expresa la *"supremacía de la representación sobre la realidad"* (Bachelard, 1968, p. 62): "La representación del camino de purificación concede que hay allí 'algo' continuo.[29] Las sustancias emergen así de la adquisición creciente de características: se vuelven más inteligibles y mejor articuladas conforme incorporan 'cada vez más las condiciones necesarias para detectarlas' " (Bachelard, 1968, p. 59). En otras palabras, las sustancias se van convirtiendo en actores cada vez más confiables o estables en las interacciones experimentales y tecnológicas, esto es, al definirse las situaciones en que aquéllas se reafirman de ciertas maneras.[30] La trayectoria, pues, se representa gráficamente en relación con dos variables: el tiempo que transcurre a medida que se produce el trabajo de la ciencia, y una escala que registra la especificidad creciente de las características con las que se llega a identificar la sustancia.

En el curso de sus propias investigaciones metaquímicas, Bruno Latour produjo la gráfica de Bachelard, que representa, no el descubrimiento de Tasmania, sino su "construcción" mediante la colaboración de navegantes, exploradores, barcos, corrientes, costas, cartógrafos, etcétera (figura XIX.2).

Con el tiempo, y mediante el trabajo colectivo de los científicos, un vago "algo que está allí" adquiere cada vez más características y asociaciones, se institucionaliza en el nexo de numerosas ocasiones, hasta convertirse en la "Tasmania moderna", a la que hoy nos referimos con gran exactitud.[31] La gráfica de Latour intenta captar también cómo esta representación de la sustancia concedida por un "camino histórico de ocasiones reales" salva la brecha entre realismo y antirrealismo (Whitehead, 1978, p. 80).

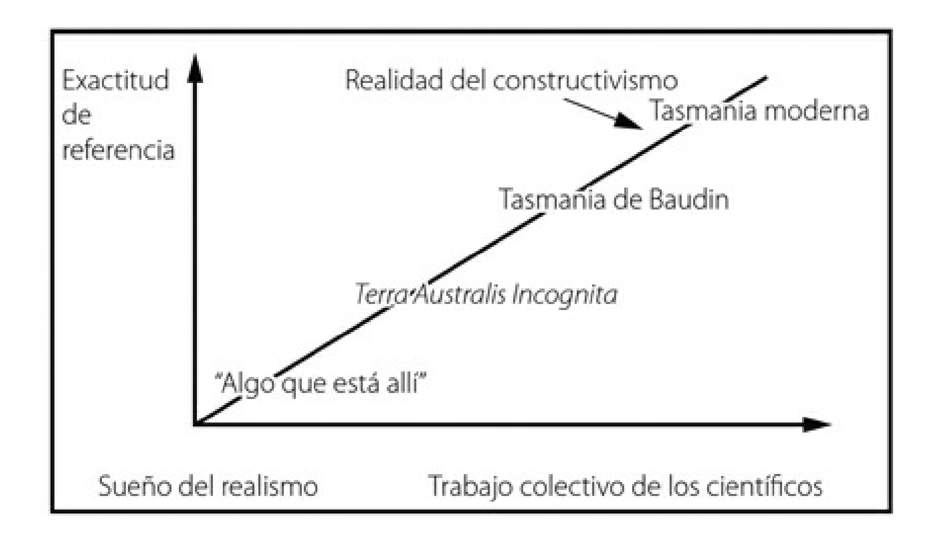


FIGURA XIX.2. *La realización ("descubrimiento", exploración, cartografía, etc.) de Tasmania (Latour, 1990, p. 68*).

El "sueño del realismo" contempla la trayectoria prospectivamente como el desenvolvimiento de una realidad sustancial dada. Los realistas metafísicos sostendrían que Tasmania siempre fue lo que es, que no le ocurrió otra cosa más que ser descubierta y que no ha cambiado sustancialmente desde la época en que era totalmente desconocida y estaba desprovista de toda característica especificada, hasta el día de hoy, en que está descrita con todo detalle. Latour y la metaquímica de la ciencia consideran una obsesión peculiar este esfuerzo por insistir en que la "Tasmania moderna" es idéntica a la sustancia intemporal, eterna, que, en el sueño del realismo, debe de haber existido desde el principio.[32] Se puede entender esta obsesión si se entiende que para el metafísico la atemporalidad de las sustancias sirve de fundamento a lo real y que, por tanto, la negación de esta identidad nos arrojaría al vacío del relativismo y nos privaría de toda realidad *(cf*. Latour, 1999, pp. 3-9, 296).

La "realidad del constructivismo", por otra parte, considera el punto de origen de la gráfica un referente común ficticio, el vago "algo que está allí", al que se van sumando características poco a poco, y se le atribuyen retroactivamente. La trayectoria misma, esto es, la historia de "Tasmania", vincula el sueño del realismo (mundo) con la realidad del constructivismo (lenguaje). En vez de contraponer el realismo al constructivismo, Latour arguye que el sueño de una realidad estable se realiza en la medida en que se forja la estabilidad, y uno de los caracteres que adquiere "Tasmania" en el curso de sus interacciones con navegantes, cartógrafos, habitantes, es el de la obstinación o persistencia.[33] Si las cosas, los objetos, las sustancias y los hechos tienen historias, es muy posible que hayan sido distintos en el pasado y que todavía no tuvieran ciertos rasgos definidos antes de que el ser humano se encontrase con ellos. Sin embargo, Tasmania demostró tal constancia y confiabilidad que extrapolamos fácilmente su existencia al futuro y al pasado, afirmando por una especie de argumento inductivo que poseía sus características más estables incluso antes de que adquiriesen el carácter de interacciones de estabilidad.[34] El metaquímico Latour coincide así con Whitehead,

Bachelard y Charles Sanders Peirce, filosóficamente más radical y sofisticado que cualquiera de los dos anteriores. Todos ellos consideran que la realidad está al final de la investigación o aparece en su camino.

Si la metaquímica es a la metafísica lo que la química a la física, ¿cuál es entonces su relación? La respuesta a esta pregunta nos lleva al espinoso asunto de si la física es en cierto modo fundamental o anterior a la química, pregunta intencionada en el sentido de que las nociones mismas de lo “fundamental” y lo “anterior” tienen inscrito en sí “metafísica” y no metaquímica. He aquí un bosquejo tentativo de la relación: Bachelard y Meyerson coinciden en algo (aunque Latour tiende a perderlo de vista):[35] que la metafísica fija la imagen científica del mundo, esto es, las condiciones de inteligibilidad. La metafísica es, en este sentido, conceptualmente anterior y ulterior; formula (como Meyerson subrayó de la manera más explícita) una previsión idealizada de lo que se propone la ciencia. En términos de Peirce, habría que decir que la metafísica introduce la hipótesis de la realidad. ¿Cómo debemos concebir el mundo y la naturaleza si queremos alcanzar o realizar una realidad estable y representable? Y en términos kantianos podría decirse que la metafísica especifica las condiciones previas a la posibilidad de conocimiento objetivo. El mundo que la metafísica postula es todo lo que existe, esto es, el mundo estático del *Tractatus* de Wittgenstein, que está compuesto de estados de cosas discretos y que es susceptible de representación. La ciencia moderna de la química también persigue ese mundo, y la (meta)física ha entrado, por tanto, en la química mediante los principios de conservación, mediante la tabla periódica y su interpretación en relación con átomos sustanciales o con moléculas y una pluralidad insustancial de elementos. También entra en la química mediante la mecánica cuántica y las herramientas de análisis que la acompañan.[36]

La metaquímica, en cambio, informa y sigue la práctica de la ciencia. Avanzando a su lado, describe su materia, esto es, las operaciones que transcurren en las mentes y los laboratorios de los científicos: ¿Qué clases de transformación producen una representación duradera del mundo, que pueda fijarse en el pensamiento como un mundo de representación? Cualquier teoría de la investigación debe, por tanto, tratar objetos y sustancias, instrumentos y proposiciones, modelos y teorías, naturaleza y cultura, mente y materia de manera metaquímica en sus trayectorias históricas. En términos de Peirce, habría que decir que la metaquímica desarrolla la hipótesis de la realidad: ¿cómo interactúan los seres humanos y la naturaleza en la fijación de las creencias y la realidad?[37] Si dispusiéramos aquí de términos kantianos, se referirían a las condiciones previas a la síntesis de la apercepción. El Wittgenstein tardío, en todo caso, consideró la metaquímica al tratar de relacionar oraciones como “todo es cambio” con el mundo estático del *Tractatus*. En la medida en que la química sigue siendo una ciencia de devenir (Earley, 1981; Müller, 1994), y en la medida en que todas las ciencias se ocupan en la realización de lo real, la metaquímica se extiende de la práctica de la química a los laboratorios de física.

El fin prioritario de la (meta)física consiste, pues, en la imagen científicamente propuesta de un mundo objetivamente conocible, las causas finales y formales de la investigación científica. El fin prioritario de la (meta)química, por otra parte, consiste en

la fabricación sintética de este mundo estable de representación, el material, y las causas eficientes de la investigación científica.

BIBLIOGRAFÍA

Bachelard, G., *Le pluralisme cohérent de la chimie moderne*, Vrin, París, 1932.

———, *The Philosophy of No: A Philosophy of the Scientific Mind*, Orion Press, Nueva York, 1968.

———, *La philosophie du non. Essai d'une philosophie du nouvel esprit scientifique*, Presses Universitaires de France, París, 1981.

Bachelard, G., *The New Scientific Spirit*, Beacon Press, Boston, 1984.

Bensaude-Vincent, B., "The Balance between Chemistry and Politics", *The Eighteenth Century*, vol. 33, núm. 2, 1992, pp. 217-237.

———, "Mendeleev: Die Geschichte einer Entdeckung", en M. Serres (ed.), *Elemente einer Geschichte der Wissenschaften*, Suhrkamp, Fráncfort, 1994, pp. 791-827.

Brunschvicg, L., *Le rôle du pythagorisme dans l'évolution des idées*, Hermann, París, 1937.

Earley, J., "Self-Organization and Agency: In Chemistry and in Process Philosophy", *Process Studies*, vol. 11, núm. 4, 1981, pp. 242-258.

Eisler, R., *Wörterbuch der philosophischen Begriffe*, 2ª ed., 2 vols., Mittler, Berlín, 1904.

Feyerabend, P., "Concluding Unphilosophical Conversation", en G. Munévar (ed.), *Beyond Reason: Essays on the Philosophy of Paul Feyerabend*, Kluwer, Dordrecht, 1991, pp. 487-527.

Lange, F. A., *The History of Materialism and Criticism of Its Present Importance*, Harcourt, Nueva York, 1925.

Latour, B., "The Force and the Reason of Experiment", en H. LeGrand (ed.), *Experimental Inquiries*, Kluwer, Dordrecht, 1990, pp. 49-80.

———, "Do Scientific Objects Have a History? Pasteur and Whitehead in a Bath of Lactic Acid", *Common Knowledge*, vol. 5, núm. 1, 1996, pp. 76-91.

———, *Wir sind nie Modern gewesen. Versuch einer symmetrischen Anthropologie*, Akademie Verlag, Berlín, 1995.

———, *Pandora's Hope: Essays on the Reality of Science Studies*, Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, 1999.

———, "On the Partial Existence of Existing *and* Nonexisting Objects", en L. Daston (ed.), *Biographies of Scientific Objects*, University of Chicago Press, Chicago, 2000, pp. 247-269.

Mach, E., *History and Root of the Principle of Conservation of Energy*, Open Court, Chicago, 1911.

Mathieu, M., *Les réactions topochimiques*, 3 vols., Hermann, París, 1936.

Matisse, G., *Le primat du phénomène dans la connaissance*, t. II de *La philosophie de la nature*, Presses Universitaires de France, París, 1938.

Meyerson, É., *Identity and Reality*, George Allen & Unwin, Londres, 1930.

———, *Explanation in the Sciences*, Kluwer, Dordrecht, 1991.

Michaëlis, C. (ed.), *Kirchners Wörterbuch der philosophischen Grundbegriffe*, 5ª ed. rev. por Carl Michaëlis, Dürr'sche Buchhandlung, Leipzig, 1907.

Müller, A., "Supramolecular Inorganic Species: An Expedition into a Fascinating, Rather Unknown Land Mesocopia with Interdisciplinary Expectations and Discoveries", *Journal of Molecular Structure*, vol. 325, núm. 1, 1994, pp. 13-35.

Nordmann, A., "Blinded to History? Science and the Constancy of Nature", en M. Carrier, G. Massey y L. Ruetsche (eds.), *Science at Century's End: Philosophical Questions on the Progress and Limits of Science*,

University of Pittsburgh Press, Pittsburgh, Pensilvania, 2000, pp. 150-178.

Peirce, C. S., en N. Houser y C. Kloesel (eds.), *The Essential Peirce*, Indiana University Press, Bloomington, Indiana, 1992.

Prigogine, I., e I. Stengers, *Order out of Chaos: Man's New Dialogue with Nature*, Bantam, Toronto, 1984.

Ramsey, J., "On Refusing to be an Epistemologically Black Box: Instruments in Chemical Kinetics during the 1920s and '30s", *Studies in History and Philosophy of Science*, vol. 23, núm. 2, 1992, pp. 283-304.

Renaud, P., *Structure de la pensée et définitions expérimentales*, Hermann, París, 1934.

Stengers, I., "Die doppelsinnige Affinität: Der newtonische Traum der Chemie im achtzehnten Jahrhundert", en M. Serres (ed.), *Elemente einer Geschichte der Wissenschaften*, Suhrkamp, Fráncfort, 1994, pp. 527-567.

Tiles, M., *Bachelard: Science and Objectivity*, Cambridge University Press, Cambridge, 1984.

Wahl, J., "Satire", *La Nouvelle Revue Française*, vol. 50, núm. 297, 1º de junio de 1938, pp. 927-934.

Weber, M., *Gesammelte Aufsätze zur Religionssoziologie*, vol. 1, Klostermann, Tubinga, 1920.

Whitehead, A. N., *The Concept of Nature*, Cambridge University Press, Cambridge, 1920.

———, *Process and Reality: An Essay in Cosmology*, The Free Press, Nueva York, 1978.

---

[1] Los trabajos pequeños con títulos grandes están destinados a ser programáticos. Éste no es la excepción y, junto con Nordmann (2000), marca apenas el comienzo de lo que debería convertirse en un prolongado camino de investigación.

[*]Departamento de Filosofía, Technische Universität Darmstadt.

[2] Sigo aquí el original en francés: "Dès maintenant, une métachimie nous paraît possible […] La métachimie serait à la métaphysique dans le même rapport que la chimie à la physique" (Bachelard, 1981, p. 53).

[3] Véase Latour (1999, pp. 142-144) sobre la relación entre articulación y realización (relación destacada ya por Charles Sanders Peirce). También se ha propuesto una postura metaquímica en la obra tardía de Feyerabend (1991, pp. 507-521).

[4] Enseñó física y química de 1919 a 1930 en el Collège Bar-sur-Aube; una de sus dos disertaciones de 1927 se refería a la propagación térmica en los sólidos, y en 1932 publicó *Le pluralisme cohérent de la chimie moderne*. Sobre la filosofía de la ciencia de Bachelard, véase Tiles, 1984.

[5] Aunque Bachelard rechaza la ontología conservadora o lavoisiana de Meyerson de identidades atemporales en lugar de sustancias historizadas, comparte con él la convicción de que la ciencia racionaliza la naturaleza. Latour completa la crítica de Meyerson al rechazar el racionalismo de Bachelard y criticar su opinión de que las interrupciones epistemológicas objetivan la ciencia desplazando las opiniones intuitivas y mitológicamente "realistas" (Latour, 1995, pp. 81, 124 y ss.).

[6] Además de algunas de las siguientes citas, véanse los comentarios inaugurales de Ted Benfey en la Conferencia Internacional sobre Filosofía de la Química de 1999.

[7] Bachelard describe cómo "cada sustancia simple de hecho recibió una subestructura. Y lo característico era que esta subestructura se revelaba como poseedora de una esencia totalmente distinta de la del fenómeno que se estudiaba. Al explicar la naturaleza química de un elemento por una organización de partículas eléctricas […] se constituyó [una] especie de no química para sostener a la química" (Bachelard, 1968, p. 52).

[8] Esto puede verse, por ejemplo, en dos diccionarios históricos de filosofía que representan el estado de la discusión filosófica en la época en que Whitehead entra en escena, seguido poco después por Bachelard. Véanse las entradas de "Substanz" en Michaëlis (1907, pp. 607-610) y Eisler (1904, vol. 2, pp. 450-464).

[9] Son “gemelos exasperantes” porque surgieron juntos, al lado de la concepción metafísica de la sustancia. Según Bachelard, para el realista metafísico *“la existencia es una función monótona”*, o sea, todo es real o irreal de la misma manera, en el sentido de que o bien existe o bien no existe: “[…] el electrón, el núcleo, el átomo, la molécula, la partícula coloidal, el mineral, el planeta, la estrella, la nebulosa” (Bachelard, 1968, p. 46).

[10] De hecho, el desarrollo de las ciencias durante el extenso siglo XIX (1780-1920) —el desarrollo de la química moderna, la mecánica estadística, el darwinismo, la electrodinámica, la relatividad y la teoría cuántica— también cuestionó implícitamente el concepto físico de sustancia. Según Wilhelm Ostwald, pues, la noción de “sustancia” no hace sino fijar a los científicos la tarea de determinar qué posee y qué no posee la propiedad de la conservación o persistencia *(cf*. Eisler, 1904, vol. 2, p. 464). Valdría la pena realizar el proyecto de ver hasta cuán atrás en el siglo XIX se remonta la idea de que la noción química de sustancia se contrapone tan profundamente a la física como para requerir una reorientación de la filosofía. Ya en 1863, por ejemplo, Ernst Mach critica la concepción mecánica de la sustancia al señalar su inaplicabilidad a la química. No se debía “imaginar a los elementos químicos yaciendo unos junto a otros en un espacio de tres dimensiones”, pues de otro modo “puede escapársenos una multitud de las relaciones de los elementos” (Mach, 1911, p. 53; véanse pp. 43, 54, 86 y ss.). Lange cita a Mach en su *Historia del materialismo* (1925, p. 388). Según el prefacio de 1925 de Bertrand Russell a la edición inglesa, la misma obra de Lange contribuía a la crítica del concepto de sustancia que “persistió en la práctica de la física” hasta el advenimiento de la teoría de la relatividad. Hoy en día, al decir de Russell, la física por fin puede conceder que “[n]ada es permanente, nada perdura; el prejuicio de que lo real es lo persistente debe abandonarse” (Lange, 1925, p. xii).

[11] Bachelard cita un ejemplo concreto referente a las cadenas de grupos de CH_2 de Mathieu (1936, vol. 1, p. 9).

[12] Bruno Latour defiende y tal vez aclara la fuerte afirmación de Bachelard de que los metafísicos definen “la realidad como una masa de irracionalidad”. Según Latour, la concepción metafísica de la sustancia se recomienda a sí misma a primera vista porque da “un significado claro al valor de verdad de una declaración”: puede decirse que las declaraciones científicas refieren si, y sólo si, a ellas corresponden estados de cosas sustanciales (véase, en el *Tractatus* de Wittgenstein [2.0211], el estrecho vínculo entre sustancialismo físico y la representabilidad de los estados de cosas). Sin embargo, con la noción de referencia surge el problema de cómo salvar la brecha entre el lenguaje y el mundo: “Pese a los miles de libros que los filósofos del lenguaje han arrojado al abismo que separa el lenguaje del mundo, no hay señales de que la brecha pueda llenarse […] sólo que ahora tenemos una versión increíblemente sofisticada de lo que ocurre en un polo —el del lenguaje, la mente, el cerebro, y hoy incluso la sociedad— y una versión totalmente empobrecida de lo que sucede en el otro, esto es, *nada*” (Latour, 1999, p. 148).

[13] “Falta todavía por escribir la historia de la doctrina de la materia. Es la historia de la filosofía griega de la ciencia. […] La entidad ha sido separada del factor que es el término de la conciencia sensorial. Se ha convertido en el sustrato de ese factor, y el factor ha sido degradado al rango de atributo de la entidad. Así, se ha introducido en la naturaleza una distinción que no es en verdad distinción alguna” (Whitehead, 1920, p. 16). En otras partes Whitehead describe esta transmutación como la falacia de concreción mal aplicada. Según Bachelard, el kantismo pasó de un realismo ingenuo y una metafísica tradicional a un racionalismo crítico que considera a la “sustancia” una categoría del entendimiento (véase la *Crítica de la razón pura* de Kant, nota en Bxxi). La pregunta crítica de Whitehead lo coloca entre el kantismo y la tercera etapa de la filosofía química de Bachelard (Bachelard, 1968, pp. 45, 50 y ss.).

[14] Joseph Earley (1981) amplía esta dimensión química del “acontecimiento”. Whitehead califica el “nexo

de ocasiones reales" de una manera que amenaza con volver a infiltrar en escena a la metafísica abandonada: el nexo está "interrelacionado en cierto modo determinado en algún cuanto extensivo" (1981, p. 80). Sin embargo, muy en el espíritu de la "filosofía del 'no'" de Bachelard, la concepción no metafísica y metaquímica de la sustancia de Whitehead parece *explicar* la metafísica en términos metaquímicos, es decir, como una transmutación (como, por ejemplo, mediante la concreción mal aplicada).

[15] Bachelard (1968, p. 66) busca inspiración en un comentario *sur* Whitehead de Jean Wahl: "La réflexion sur Whitehead me fournit aujourd'hui un nouvel élément: à l'idée de substance porrait-on substituer l'idée de sur-stance? (idée qu'un ensemble organique est quelque chose de supérieur à ses éléments). On retrouverait l'entéléchie aristotélicienne, la 'vérité' hégélienne, l'émergence d'Alexander" (Wahl, 1938, p. 931). Una historia filosófica de la metaquímica tendría que considerar, pues, contextos más amplios como el existencialismo francés.

[16] Es posible que fuera Isabelle Stengers quien presentó a Latour con Whitehead; *cf*. Latour (1996, 1999) y Prigogine y Stengers (1984).

[17] La mezcla de metáforas de Latour indica lo difícil que resulta aun para él escapar de recurrir a sustancias anteriores. Sobre su "búsqueda de una figura retórica", véase Latour, 1999, pp. 133-144.

[18] Latour detalla este proceso en un capítulo titulado "La historicidad de las cosas: ¿dónde estaban los microbios antes de Pasteur?" (Latour, 1999, especialmente pp. 164-172; véase también Latour, 2000).

[19] Compárese la descripción de Bernadette Bensaude-Vincent del logro de Lavoisier: "En el acto de pesar, Lavoisier buscaba crear un espacio experimental que estuviera enteramente bajo el control del experimentador. Una vez equilibradas con pesas en la balanza de Lavoisier, las sustancias eran transformadas de objetos de la naturaleza en objetos de la ciencia. La balanza las despojaba de su historia natural. Poco importaban sus orígenes geográficos y geológicos, sus circunstancias de producción. Eran transformadas en muestras de materia conmensurables con un sistema de pesos estandarizados […] Al traducir la conservación de las cualidades de los elementos a términos cuantitativos y ponderales, el principio evade la pregunta de cómo —de qué manera— se conservan los elementos. ¿Cómo subsisten en compuestos y cómo se mueven de un compuesto a otro durante una reacción?" (Bensaude-Vincent, 1992, pp. 222 y ss.).

[20] Según Meyerson, el principio de Carnot referente a la irreversibilidad del tiempo es factualmente cierto, pero irracional en el sentido de que la ciencia racional sigue el principio de causalidad que presupone la reversibilidad y la identidad de antecedente y consecuente; la ciencia así "tiende a la eliminación del tiempo". El principio de Carnot reafirma la realidad al oponerse, desde fuera, a nuestros intentos científicos de racionalizarla (*cf*. Meyerson, 1930, pp. 278, 286, 317). Según Meyerson, el principio de Carnot significa un límite de la ciencia.

[21] Sin embargo, *cf*. el comentario de Bachelard de que "con la tabla de Mendeléiev nació una metaquímica", lo que parece oponerse a la constante insistencia en la metaquímica como parte de un nuevo espíritu científico (Bachelard, 1968, p. 49).

[22] "Ha de entenderse —no podemos insistir demasiado en ello— que una química no lavoisiana, como todas las actividades de la filosofía del no, no niega la utilidad de la química clásica, sea para el pasado o para el futuro. Tiende simplemente a la organización de una química más general, una panquímica, igual que la pangeometría tiende a dar el plan de las posibilidades de organización geométrica" (Bachelard, 1968, p. 55).

[23] Latour se refiere al *"un fait est fait"* de Bachelard cuando acomete su propio proyecto de mostrar cómo es posible que los hechos sean al mismo tiempo "fabricados" y "reales" (Latour, 1999, p. 127), cómo la declaración "el fermento se fabricó en mi laboratorio" puede entenderse como sinónima de "el fermento es independiente de mi fabricación" (Latour, 1999, p. 135).

[24] Según Peirce, este realismo "inverso" o kantiano no es más que realismo simple y llano, en oposición al nominalismo, que postula que la realidad es anterior a la investigación. Peirce articula lo anterior en algunos de sus primeros trabajos, incluidos en Peirce (1992). Este autor refleja la tensión entre la postura explícitamente metafísica de Meyerson, con su concepción "nominalista" de una realidad sustancial y persistente, y su descripción implícitamente metaquímica, con su concepción "realista" de la ciencia como causante de transformaciones y productora creativa de la realidad según la imagen metafísica o nominalista.

[25] Sería reconstruible una descripción más completa si se considerara Bachelard (1932), la obra de Georges Matisse, que al parecer acuñó el término "no lavoisiano" (Matisse, 1938), quizá *Structure de la pensée et définitions expérimentales*, de Paul Renaud (1934), y la influencia en Bachelard de Leo Brunschvicg (1937).

[26] En la edición en inglés se lee por error *water* por *matter* ["agua" por "materia"], pero véase Bachelard, 1981, p. 64.

[27] Sobre la "emergencia" de "sur-stancia" (en un sentido de entelequia artistotélica o hegeliana) y sobre cómo la inspiraron Wahl y Whitehead, véase la nota 15, *supra*.

[28] Véanse las notas 31 y 35, *infra*.

[29] Al interés de Bachelard en la "representación" (Bachelard, 1968, pp. 62-64) corresponde la apropiación de Latour de la "proposición" de Whitehead (Latour, 1999, pp. 141, 148): ambos términos eluden las esferas engañosamente dicotomizadas de nóumeno y fenómeno (Bachelard), de sujeto y objeto (Latour).

[30] Las oraciones que anteceden han empezado a fusionar los vocabularios de Bachelard y Latour.

[31] Aunque la construcción y el sostenimiento de un hecho requiere una trayectoria ininterrumpida, ¿por qué debe ser ésta también recta? Jeff Ramsey plantea esta cuestión *(cf.* Ramsey, 1992): ¿compromete a Latour su antimentalismo con la opinión de una conspiración ineludible de asociaciones que tiende a la concordancia, la estabilidad, la acumulación de propiedades? Si las ideas o las interrupciones epistemológicas cumplen alguna función, ¿puede ser otra que introducir la inestabilidad, abrir cajas negras, desentrañar una realidad consumada? Sustituyendo trayectorias por rieles, Max Weber propone un enfoque alternativo: "Los intereses —materiales e ideales—, y no las ideas, rigen directamente las acciones del ser humano. Sin embargo, las visiones del mundo creadas por estas ideas a menudo han determinado, como guardagujas, los rieles por los que la dinámica del interés impulsa las acciones" (Weber, 1920, p. 252). La noción de que las ideas dan *dirección* a los acontecimientos y alteran su rumbo es congruente con la insistencia de Latour (y de Peirce) en la continuidad y en la cadena *ininterrumpida* de operaciones: "Ocurre con los hechos científicos como con los pescados congelados, que la cadena de frialdad que los mantiene frescos no puede interrumpirse ni por un momento" (Latour, 1995, p. 159). Así, aunque la trayectoria tiene que ser ininterrumpida, no hay necesidad de que sea recta, y de hecho va de un lado a otro en las gráficas más recientes de Latour (Latour, 2000, p. 256).

[32] La crítica de Latour de esta obsesión se discute en Nordmann, 2000. Su crítica ejemplifica otra dimensión de sus compromisos literalmente no lavoisianos, a saber, su opinión de que la experimentación no debería considerarse un juego en el que nada se gana ni se pierde.

[33] Compárese a Bachelard (1968, p. 13): "La sustancia química llegará a representarse como parte —una mera parte— de un proceso de diferenciación; lo real llegará a representarse como un momento de realización bien ejecutado".

[34] "Una pequeña historia da origen al relativismo", escribe Latour; "una gran cantidad engendra al realismo" (Latour, 1996, p. 91). Si historizamos sólo nuestros modos de conocer, permanecemos limitados a la metafísica y abrimos un abismo entre la verdad eterna y el conocimiento construido; si, en cambio, historizamos la producción al igual que los objetos de conocimiento, se hace posible un realismo peirceano. Peirce y Latour exponen en

detalle esta posibilidad cuando intentan explicar cómo llegan a conocerse o determinarse los objetos de tal manera que sus especificaciones adquiridas parecen intemporales. Lo que el objeto adquiere con el tiempo es sustancia; en otras palabras, asume una naturaleza, y así una sustancia puede *llegar a ser* algo que *siempre ha sido*. Estas proposiciones requieren obviamente mayor escrutinio crítico; la breve descripción que aquí se da es demasiado esquemática. *Cf*. nota 24, *supra*. Latour, 1999, pp. 145-173.

[35] Quizá debería decir "como Latour debe perder de vista", ya que su propósito inicial es ofrecer, sin referencia alguna a entidades mentales (ideas, creencias), una "antropología" simétrica que pueda *explicar* el mundo en su estado presente; esto es, que pueda explicar lo que es y *mediante qué actividad ha llegado a diferenciarse*. En contraste, la postura metafísica *reflexiona* sobre nuestras *representaciones* del mundo. Una vez que se considera al pensamiento una actividad humana poderosa, importante y continua que a veces produce representaciones, es posible apreciar la relación entre la metaquímica dinámicamente continua de Latour y una metafísica estáticamente reflexiva.

[36] Bernadette Bensaude-Vincent ha pormenorizado las luchas y concesiones que acompañaron esta conformación de la química a una imagen metafísica de la ciencia.

[37] La física y la metafísica articulan un marco ontológico atemporal, quizá cuantitativo; la química y la metaquímica estudian el auténtico cambio cualitativo, esto es, procesos que no se pueden representar como desplazamientos de puntos materiales. La imagen que invoco aquí de la relación entre la (meta)física y la (meta)química tiene todos los sellos distintivos de la filosofía científica de finales del siglo XIX. Es cuestionable, desde luego, si esta imagen sobrevivió al siglo XX.

En contraste con la larga y productiva trayectoria de la química, se podría decir que la filosofía de la química es una disciplina recién nacida. Este hecho es intrigante si se considera la importancia y el peso que tiene la química en cuanto disciplina científica (su liderazgo mundial en número de publicaciones, de profesionales y de estudiantes), pero sobre todo cuando tomamos conciencia de la profunda y ubicua transformación que ésta ha operado en nuestro entorno y forma de vida.

La presente obra es un compendio de las diversas líneas de trabajo que atraviesan este próspero campo de investigación, entre las cuales se encuentran la cuestión sobre los métodos y estrategias propios de la química; el problema de los sistemas de clasificación y sus implicaciones ontológicas; el tema de cómo reformular las relaciones entre ciencia y tecnología a la luz de los estrechos y antiguos lazos que mantiene la química con la industria; la tarea de formular una ética para la profesión química, y, finalmente, el debatido asunto de la relación entre la química y la física.





Índice

Índice 5
Primera Parte. LA QUÍMICA Y LA FILOSOFÍA DE LA QUÍMICA 7
I. Introducción. la Invisibilidad de la química, Davis Baird, Eric Scerri y Lee McIntyre 8
II. La Filosofía de la química. De la infancia hacia la madurez, Joachim Schummer 33
Segunda Parte. LA QUÍMICA Y LA HISTORIA Y LA FILOSOFÍA DE LA CIENCIA 65
III. Teoría Aristotélica de la reacción y las sustancias químicas, Paul Needham 66
IV. El legado de Kant a la filosofía de la química, J. van Brakel 98
Tercera Parte. LA QUÍMICA Y LA FILOSOFÍA CONTEMPORÁNEA DE LA CIENCIA 130
V. La estructura conceptual de las ciencias. Resurgimiento de la dimensión humana, Otto Theodor Benfey 131
VI. Filosofía normativa y descriptiva de la ciencia y el papelde la química, Eric R. Scerri 167
VII. Cómo fallan los modelos clásicos de explicación en el abordaje de la química. El caso de la modelización molecular, Johannes Hunger 183
VIII. La ética profesional en la ciencia, Jeffrey Kovac 222
Cuarta Parte. LA QUÍMICA Y LA FÍSICA 242
IX. ¿Hay causación descendente en química?, Robin Findlay Hendry 243
X. La física en el crisol de la química. Fronteras Ontológicas y modelos epistemológicos, G. K. Vemulapalli 266
Quinta Parte. LA TEORÍA QUÍMICA Y LOS PROBLEMAS DE SUS FUNDAMENTOS 287
XI. Algunas implicaciones filosóficas de la simetría química, Joseph E. Earley 288
XII. Los sistemas periódicos de moléculas. presupuestos, problemas y perspectivas, Ray Hefferlin 307
XIII. Un nuevo paradigma para Schrödinger y Kohn, Jack R. Woodyard 354
Sexta Parte. LA QUÍMICA Y SUS HERRAMIENTAS DE REPRESENTACIÓN 392
XIV. Herramientas virtuales. Cuestiones epistemológicas y sociales del diseño de procesos químicos computarizado, Ann Johnson 393

XV. El Espacio en la representación molecular, o cómo representan objetos las imágenes, S. H. Vollmer 424
XVI. Técnicas instrumentales de visualización en la química de superficies, Daniel Rothbart y John Schreifels 445
Séptima Parte. LA QUÍMICA Y LA ONTOLOGÍA 467
XVII. ¿Son las clases químicas clases naturales?, Nalini Bhushan 468
XVIII. El agua no es H2O, Michael Weisberg 485
XIX. De la metafísica a la metaquímica, Alfred Nordmann 499